

TECHNISCHE UNIVERSITÄT BERGAKADEMIE FREIBERG

Die Ressourcenuniversität. Seit 1765.

Tagungsband

2. Tage der Standortauswahl 11. & 12. Februar 2021

TU Bergakademie Freiberg – Institut für Geotechnik

Local Organizing Committee

Institut für Geotechnik

Lehrstuhl für Bodenmechanik und Grundbau Prof. Dr. Thomas Nagel Lehrstuhl Gebirgs- und Felsmechanik/Felsbau Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Konietzky Institut für Bergbau und Spezialtiefbau Lehrstuhl für Erdbau und Spezialtiefbau Prof. Dr.-Ing. Wolfram Kudla Institut für Geologie Lehrstuhl für Hydrogeologie und Hydrochemie Prof. Dr. Traugott Scheytt Institut für Geophysik und Geoinformatik Lehrstuhl für Angewandte Geophysik/Prospektionsgeophysik Prof. Dr. Stefan Buske

Herausgeber: Institut für Geotechnik — TU Bergakademie Freiberg Redaktion/Organisation: Robert Otte, Katharina Kühnert

Inhaltsverzeichnis

Vorbereitung und Durchführung der 3D-Seismik Asse Dr. Andreas Schuck – GGL Geophysik und Geotechnik Leipzig GmbH
Seismische Datenbearbeitung: Ein Schlüssel zur Standortauswahl M. Scholze, H. Ding
How to use AI-based algorithms for identification and evaluation of nuclear waste disposal sites A. Brosig, A. Barth, A. Knobloch, P. Hielscher, N. Hoth, K. P. Stanek
Ultraschallprüfung von Verschlussbauwerken im Salinar E. Niederleithinger, F. Mielentz, U. Effner, H. Stolpe, T. Oesch, P. Prabhkar
Outcome from the Meuse/Haute-Marne Underground research Laboratory on the behaviour of Callovo-Oxfordian claystone to different excavation technics: from the rock to the structure Gilles Armand – Agence Nationale pour la Gestion des Déchets RadioactifsANDRA
Zusammenstellung von Erkundungszielen und -methoden für die übertägige Erkundung bei derStandor- tauswahl <i>T. Kneuker, T. Beilecke, L. Pollok, N. Schubarth-Engelschall, R. Semroch</i>
Entwicklung der Datenbank GeM-DB zur Planung von übertägigen Erkundungsprogrammen T. Beilecke, L. Pollok, N. Schubarth-Engelschall, R. Semroch
Über die quartären Vulkanfelder hinaus -Indikatoren für einen zukünftigen Vulkanismus in Deutschland L. Rummel, A. Bartels, F. May
Seismic tomography under anisotropic conditions at the scale of an Underground Rock Laboratory in- Opalinus Clay (Mont Terri) <i>R. Esefelder, B. Wawerzinek, S. Lüth, R. Giese, C. M. Krawczyk</i>
Performance test of seismic sources in clay B. Wawerzinek, S. Lüth, R. Esefelder, R. Giese, C. M. Krawczyk
Faseroptische Strahlungssensoren f
Modellunterstützte Analysen zur Wirksamkeit der geologischen Barrieren als Beitrag zur Standor- tauswahl für geologische Tiefenlager in der Schweiz Dr. Paul Marschall – Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle NAG 47
The Role of Geological Models and Uncertainties in Safety Assessments M. Bjorge, P. Kreye, E. Heim, F. Wellmann, W. Rühaak
UMAN –A EURAD Work Package dedicated to networking on uncertaintymanagement A. Strusińska-Correia, A. Göbel, F. Lemy, V. Detilleux, DA. Becker, D. Diaconu, J. Dewoghélaër, M. Wengle

Räumlich und zeitlich aufgelöste lokale und globale Sensitivitätsanalyse der Konsolidation um eine punktförmige Wärmequelle A. Chaudhry, J. Buchwald, T. Nagel
Thermische Integrität von Ton und Tonsteinen -Experiment und gekoppelte THMC-Simulation A. Meleshyn, K. Jantschika, M. Kröhna, O. Czaikowskia, L. Nguyen-Thanh
Safety Analytical Investigations of Repository Systems in Crystalline Rock J. Flügge, A. Hassanzadegan, Ch. Müller, M. Johnen, H. Zhao, J. Sönnke
Risk to radioactive waste repositories from heavy rainfall and flooding C. Mudersbach, F. Simon
Welche Prozesse könnten zur Festlegung einer "Grenztemperatur" an der Außenfläche von Behältern in einem Endlager zugrunde gelegt werden? Dr. Guido Bracke – Gesellschaft für Anlagen-und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH
Modelling gas migration in tight barriers. Activities of the 'German Cluster' within the European Joint Programme on Radioactive Waste Management – Work package GAS <i>M. Pitz, N. Grunwald, A. Hassanzadegan, O. Kolditz, J. Maßmann, C. Müller, T. Nagel, E. Simo, W.</i> <i>Wang,M. Wengler, G. Ziefle</i>
Towards THM modelling of the FE experiment at Mont Terri within the DECOVALEX project S. Kaiser, W. Wang, M. Bjorge, W. Rühaak, T. Nagel
Coupled modelling of moisture and heat transfer in partially saturated clay H. Pham, W. Rühaak, M. Eckhardt, I. Sass
Anforderungen an Behälter für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein Dr. Holger Völzke – Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM)
Berechnung des teufenabhängigen Flächenbedarfs für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle im kristalli- nen Wirtsgestein <i>E. Simo, N. Bertrams, T. Lohser</i>
Ausbau von Grubenbauen für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in Tongestein P. Herold, E. Simo, HJ. Engelhardt, H. Räuschel, J. Te Kook, B. Pflüger, C.Scior, A.Studeny, M. Manica, T. Meyer
EURAD Knowledge Management – Work Package "State-of-Knowledge" T. Knuuti, C. Zehrt, C. Franzen, D. Abbasova, I. Iarmosh, O. Tokarevskyi, T. Arnold, V. Brendler, A. Göbel
 OpenGeoSys Workflows -Modelling Platform for Multi-Field Processes in Deep Geological Repositories O. Kolditz, M. Barsch, L. Bilke, J. Buchwald, A. Chaudhry, C. Chen, S. Chen, T. Deng, T. Fischer, N. Grunwald, S. Kaiser, T. Kalbacher, D. Kern, R. Lu, T. Meisel, B. Meng, M. Mollaali, V. Montoya, D. Naumov, F. Parisio, K. Rink, J. Garibay Rodriguez, O. Sen, C. Silbermann, H. Shao, W. Wang, N. Watanabe, K. Yoshioka, F. Zill, T. Nagel
Entwicklung eines Referenzmodells zur thermischen Modellierung eines Endlagerbehälters im deutschen Kristallingestein mit Hilfe von FEFFLOW M. Werres, KJ. Röhlig, W. Rühaak

Tagesanlagen eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle F. Schlüter, D. Gawletta, J. Dannemann, T. Lohser
Das Nationale Begleitgremium und seine Rolle nach Geologiedatengesetz Prof. Dr. Magdalena Scheck-Wenderoth – Nationales Begleitgremium
Vorschau auf die Ermittlung von Standortregionen für die übertägige Erkundung im Schritt 2 der Phase I des Standortauswahlverfahrens (§ 14 StandAG) PD Dr. Wolfram Rühaak – BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH
Vorstellung der Planungen zu Forschung- & Entwicklungsvorhaben in der Standortauswahl Astrid Göbel – BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH
Ermittlung von Teilgebieten als Schritt 1 der Phase I des Standortauswahlverfahrens (§ 13 StandAG) Dr. Sönke Reiche – BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH
Geochemie, Transport- und Rückhalteprozesse in den potentiellen Wirtsgesteinen Ton und Kristallin Univ. Prof. Dr. habil. Thorsten Schäfer – Friedrich-Schiller-Universität Jena
Conceptual models for predicting the chemical evolution of HLW and ILW disposal cells in clay and crystallinerocks V. Montoya, J. Samper, L. De Windt, J. Govaerts, L. Montenegro, D. Jacques, G. Kosakowski, J. Garibay-Rodriguez, M. Leivof
Untersuchungen zur Wärmeentwicklung von hybriden Zementen R. Henning, P. Sturm, HC. Kühne, S. Keßler, G. J. G. Gluth
Smart Kd-concept as efficient approach to improve geochemistry in reactivetransport modelling for repository safety assessment <i>M. Stockmann, U. Noseck, J. Flügge, A. Gehrke, V. Brendler</i>
f-element sorption onto K-feldspar –A comprehensive characterization of mechanism and thermodynam- ics J. Neumann, H. Brinkmann, S. Britz, J. Lützenkirchen, F. Bok, M. Stockmann, V. Brendler, T. Stumpf, M. Schmidt
Spatially-resolved sorption of Cm(III)/Eu(III) on heterogeneous crystalline rocks M. Demnitz, K. Molodtsov, S. Schymura, A. Schierz, K. Müller, T. Stumpf, M. Schmidt
Uranium(VI) reduction by a sulphate-reducing microorganism in Opalinus Clay pore water S. Hilpmann, B. Drobot, R. Steudtner, F. Bok, T. Stumpf, A. Cherkouk
Porosity and pore network analysis of the sandy facies of Opalinus Clay host rock T. Bollermann, C. Fischer
Reductive immobilization of 99Tc(VII) by different crystalline phases of iron sulfide (FeS2) D. M. Rodríguez, N. Mayordomo, V. Brendler, K. Müller, D. Schild, T. Stumpf
THEREDA – Thermodynamic Reference Database for the nuclear waste disposal in Germany F. Bok, H.C. Moog, M. Altmaier, D. Freyer, T. Thoenen
Aufklärung des Korrosionsmechanismus von Eisen an der Eisen/Bentonit-Grenzfläche S. Kaufhold

Simulation of multi-component diffusion and sorption of uranium through Opalinus Clay on the host rock scale
<i>T. Hennig, M. Kühn</i>
The influence of the bentonite type on the corrosion of cast iron V. Sushko, M. Dressler, S. Kluge, N. Matschiavelli, A. Schierz, T. Stumpf, A. Cherkouk
Mineral Dissolution Rates: Importance of Surface Reactivity J. Schabernack, C. Fischer



<u>PROGRAMM</u>





Donnerstag, 1	.1.02.2021 Seite 1			
09:00 – 09:30 Uhr	Eröffnung/Begrüßung			
	Prof. Dr. Klaus-Dieter Barbknecht ♦ Rektor der TU Bergakademie Freiberg Lisa Seidel ♦ BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH Prof. Dr. Thomas Nagel ♦ TU Bergakademie Freiberg			
09:30 – 10:45 Uhr	Plenarvortrag und Kurzbeiträge- Session Chair: Prof. Dr. Stefan BuskeThemengebiet Standortauswahl, Erkundung, Monitoring, Errichtung und Betrieb			
"Vorbereitung und Durchführung der 3D-Seismik Asse"				
Referent: Co-Autoren:	Dr. Andreas Schuck & GGL Geophysik und Geotechnik Leipzig GmbH F. Bilgili, L. Teichmann, G. Gärtner, H. Ding, J. Köhler			
"Seismische Datenbearbeitung: Ein Schlüssel zur Standortauswahl" <i>M. Scholze, H. Ding</i>				
"How to use Al-ba	ased algorithms for identification and evaluation of nuclear waste disposal sites" A. Brosig , A. Barth, A. Knobloch, P. Hielscher, N. Hoth, K. P. Stanek			
"Ultraschallprüfur	ng von Verschlussbauwerken im Salinar" F. Niederleithinger , F. Mielentz, I. Effner, H. Stolne, T. Oesch, P. Prabhkar			
10:45 – 11:00 Uhr	Pause			
11.00 – 12.30 Uhr	Plenarvortrag und Kurzbeiträge			
11.00 12.00 0111	Themengebiet Standortauswahl, Erkundung, Monitoring, Errichtung und Betrieb			
" Outcome from Callovo-Oxfordia	the Meuse/Haute-Marne Underground research Laboratory on the behaviour of an claystone to different excavation technics: from the rock to the structure"			
Referent:	Gilles Armand + Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs ANDRA			
Co-Autoren:	J. Zghondi, R. de La Vaissière, J. Cornet, J. Jaber			
"Zusammenstellung von Erkundungszielen und -methoden für die übertägige Erkundung bei der Standortauswahl"				
	T. Kneuker, T. Beilecke, L. Pollok, N. Schubarth-Engelschall, R. Semroch			
"Entwicklung der	Datenbank GeM-DB zur Planung von übertägigen Erkundungsprogrammen"			
	T. Beilecke, T. Kneuker, L. Pollok, N. Schubarth-Engelschall, R. Semroch			
"Über die quartär	en Vulkanfelder hinaus - Indikatoren für einen zukünftigen Vulkanismus in Deutschland" <i>L. Rummel, A. Bartels, F. May</i>			
"Seismic tomography under anisotropic conditions at the scale of an Underground Rock Laboratory in Opalinus Clay (Mont Terri)"				
	R. Esefelder, B. Wawerzinek, S. Lüth, R. Giese, C. M. Krawczyk			
"Performance test	t of seismic sources in clay"			
	B. Wawerzinek, S. Lüth, R. Esefelder, R. Giese, C. M. Krawczyk			
"Faseroptische Str	rahlungssensoren für kerntechnische Anwendungen"			
	A. Wosniok, K. Krebber			
12:30 – 13:15 Uhr	Pause			



<u>PROGRAMM</u>





Donnerstag, 1	1.02.2021 Seite 2			
13:15 – 14:35 Uhr	Plenarvortrag und Kurzbeiträge - <u>Session Chair: Prof. DrIng. Wolfram Kudla</u> -			
	Themengebiet Sicherheitsuntersuchungen und Ungewissheiten			
"Modellunterstützte Analysen zur Wirksamkeit der geologischen Barrieren als Beitrag zur				
Standortauswahl für geologische Tiefenlager in der Schweiz"				
Referent:	Dr. Paul Marschall 🕈 Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle NAGRA			
Co-Autoren:	O. Leupin, A. Papafotiou, C. Li, P. Smith			
"The Role of Geological Models and Uncertainties in Safety Assessments"				
	M. Bjorge, P. Kreye, E. Heim, F. Wellmann, W. Runaak			
"UMAN – A EURAL	A Struciácka Correia A Cöbel E Lamy V Detilleux D A Backer D Digcony L Dewoghólaör M Wangler			
"Bäumlich und zeit	A. Strasmisku-content, A. Gobel, F. Lenny, V. Detinieux, DA. Betker, D. Didtoni, J. Dewognenier, M. Wengler			
punktförmige Wär	mequelle"			
	A. Chaudhry, J. Buchwald, T. Nagel			
"Thermische Integ	rität von Ton und Tonsteinen - Experiment und gekoppelte THMC-Simulation"			
	A. Meleshyn, K. Jantschika, M. Kröhna, O. Czaikowskia, L. Nguyen-Thanh			
"Safety Analytical I	Investigations of Repository Systems in Crystalline Rock"			
	J. Flügge, A. Hassanzadegan, Ch. Müller, M. Johnen, H. Zhao, J. Sönnke			
"Risk to radioactive	e waste repositories from heavy rainfall and flooding"			
	C. Mudersbach, F. Simon			
14:35 – 14:45 Uhr	Pause			
14:45 – 16:00 Uhr	Plenarvortrag und Kurzbeiträge - <u>Session Chair: Prof. DrIng. Wolfram Kudla</u> -			
	Themengebiet Sicherheitsuntersuchungen und Ungewissheiten			
"Welche Prozess	e könnten zur Festlegung einer "Grenztemperatur" an der Außenfläche von			
Behältern in eine	em Endlager zugrunde gelegt werden?"			
Referent:	Dr. Guido Bracke 🕈 Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH			
Co-Autoren:	E. Hartwig-Thurat, J. Larue, A. Meleshyn, T. Weyand			
"Modelling gas mig	gration in tight barriers. Activities of the 'German Cluster' within the European Joint dipactive Waste Management – Work package GAS''			
	M. Pitz , N. Grunwald, A. Hassanzadegan, O. Kolditz, J. Maßmann, C. Müller, T. Nagel, E. Simo, W. Wang,			
	M. Wengler, G. Ziefle			
"Towards THM mo	odelling of the FE experiment at Mont Terri within the DECOVALEX project"			
	S. Kaiser, W. Wang, M. Bjorge, W. Rühaak, T. Nagel			
"Coupled modellin	g of moisture and heat transfer in partially saturated clay"			
	H. Pham, W. Rühaak, M. Eckhardt, I. Sass			
16:00 – 16:10 Uhr	Pause			
16:10 – 17:40 Uhr	Plenarvortrag und Kurzbeiträge - <u>Session Chair: Prof. DrIng. habil. Heinz Konietzky</u> -			
	Themengebiet Technologische Aspekte			
"Anforderungen Kristallingestein'	an Behälter für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Steinsalz, Tonstein und "			
Referent:	Dr. Holger Völzke 🔹 Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM)			
Co-Autoren:	C. Herold, D. Wolff, T. Orellana Pérez, W. Bollingerfehr, A. Wunderlich, S. Prignitz			



PROGRAMM





Donnerstag, 11.02.2021 Seite 3 "Berechnung des teufenabhängigen Flächenbedarfs für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle im kristallinen Wirtsgestein" E. Simo, N. Bertrams, T. Lohser "Ausbau von Grubenbauen für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in Tongestein" P. Herold, E. Simo, H.-J. Engelhardt, H. Räuschel, J. Te Kook, B. Pflüger, C.Scior, A.Studeny, M. Manica, T. Meyer "EURAD Knowledge Management – Work Package "State-of-Knowledge" T. Knuuti, C. Zehrt, C. Franzen, D. Abbasova, I. larmosh, O. Tokarevskyi, T. Arnold, V. Brendler, A. Göbel "OpenGeoSys Workflows - Modelling Platform for Multi-Field Processes in Deep Geological Repositories" O. Kolditz, M. Barsch, L. Bilke, J. Buchwald, A. Chaudhry, C. Chen, S. Chen, T. Deng, T. Fischer, N. Grunwald, S. Kaiser, T. Kalbacher, D. Kern, R. Lu, T. Meisel, B. Meng, M. Mollaali, V. Montoya, D. Naumov, F. Parisio, K. Rink, J. Garibay Rodriguez, O. Sen, C. Silbermann, H. Shao, W. Wang, N. Watanabe, K. Yoshioka, F. Zill, T. Nagel "Entwicklung eines Referenzmodells zur thermischen Modellierung eines Endlagerbehälters im deutschen Kristallingestein mit Hilfe von FEFFLOW" M. Werres, K.-J. Röhlig, W. Rühaak "Tagesanlagen eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle" F. Schlüter, D. Gawletta, J. Dannemann, T. Lohser Ausklang des ersten Konferenztages/Austausch in Breakout-Rooms (zoom) ab 17:40 Uhr Freitag, 12.02.2021 09:00 – 09:40 Uhr Plenarvortrag Das Nationale Begleitgremium und seine Rolle nach Geologiedatengesetz Referentin: Prof. Dr. Magdalena Scheck-Wenderoth * Nationales Begleitgremium Co-Autoren: die Mitglieder des NBG 09:40 – 11:00 Uhr Die BGE informiert – live auf YouTube Vorschau auf die Ermittlung von Standortregionen für die übertägige Erkundung im Schritt 2 der Phase I des Standortauswahlverfahrens (§ 14 StandAG) Referent: PD Dr. Wolfram Rühaak * BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH Co-Autoren: M. Bjorge, F. Panitz und das Team der Standortauswahl 11:00 – 11:15 Uhr Pause 11:15 – 13:10 Uhr Die BGE informiert – live auf YouTube Vorstellung der Planungen zu Forschung- & Entwicklungsvorhaben in der Standortauswahl Astrid Göbel * BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH Referentin: Co-Autoren: das Team der Standortauswahl Ermittlung von Teilgebieten als Schritt 1 der Phase I des Standortauswahlverfahrens (§ 13 StandAG) Referent: Dr. Sönke Reiche * BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mb Co-Autoren: das Team der Standortauswahl 13:10 - 13:45 Uhr Pause



PROGRAMM





Freitag, 12.02.2021 Seite 4				
13:45 – 15:00 Uhr	Plenarvortrag und Kurzbeiträge - <u>Session Chair: Prof. Dr. Traugott Scheytt</u> -			
	Themengebiet Geochemische und biogeochemische Prozesse			
"Geochemie, Transport- und Rückhalteprozesse in den potentiellen Wirtsgesteinen Ton und Kristallin"				
Referent:	Univ. Prof. Dr. habil. Thorsten Schäfer 🕈 Friedrich-Schiller-Universität Jena			
"Conceptual model	s for predicting the chemical evolution of HLW and ILW disposal cells in clay and crystalline rocks" V. Montoya , J. Samper, L. De Windt, J. Govaerts, L. Montenegro, D. Jacques, G. Kosakowski, J. Garibay-Rodriguez, M. Leivof			
"Untersuchungen z	ur Wärmeentwicklung von hybriden Zementen"			
	R. Henning, P. Sturm, HC. Kühne, S. Keßler, G. J. G. Gluth			
"Smart Kd-concept safety assessment"	as efficient approach to improve geochemistry in reactive transport modelling for repository <i>M. Stockmann, U. Noseck, J. Flügge, A. Gehrke, V. Brendler</i>			
"f-element sorption	onto K-feldspar – A comprehensive characterization of mechanism and thermodynamics"			
	J. Neumann, H. Brinkmann, S. Britz, J. Lützenkirchen, F. Bok, M. Stockmann, V. Brendler, T. Stumpf, M. Schmidt			
15:00 – 15:10 Uhr	Pause			
15:10 – 16:25 Uhr	Kurzbeiträge - Session Chair: Prof. Dr. Traugott Scheytt -			
	Themengebiet Geochemische und biogeochemische Prozesse			
"Spatially-resolved	sorption of Cm(III)/Eu(III) on heterogeneous crystalline rocks" M. Demnitz , K. Molodtsov, S. Schymura, A. Schierz, K. Müller, T. Stumpf, M. Schmidt			
"Uranium(VI) reduc	tion by a sulphate-reducing microorganism in Opalinus Clay pore water" S. Hilpmann, B. Drobot, R. Steudtner, F. Bok, T. Stumpf, A. Cherkouk			
"Porosity and pore	network analysis of the sandy facies of Opalinus Clay host rock" T. Bollermann , C. Fischer			
"Reductive immobil	lization of 99Tc(VII) by different crystalline phases of iron sulfide (FeS2)"			
	D. M. Rodríguez, N. Mayordomo, V. Brendler, K. Müller, D. Schild, T. Stumpf			
"THEREDA – Therm	odynamic Reference Database for the nuclear waste disposal in Germany" F. Bok , H.C. Moog, M. Altmaier, D. Freyer, T. Thoenen			
"Aufklärung des Ko	rrosionsmechanismus von Eisen an der Eisen/Bentonit-Grenzfläche" <i>S. Kaufhold</i>			
"Simulation of mult	i-component diffusion and sorption of uranium through Opalinus Clay on the host rock scale" <i>T. Hennig, M. Kühn</i>			
"The influence of th	e bentonite type on the corrosion of cast iron"			
	V. Sushko, M. Dressler, S. Kluge, N. Matschiavelli, A. Schierz, T. Stumpf, A. Cherkouk			
"Mineral Dissolution	n Rates: Importance of Surface Reactivity"			
	J. Schabernack, C. Fischer			
16:25 Uhr	Schlusswort			

Vorbereitung und Durchführung der 3D-Seismik Asse

Schuck, A.^a, Bilgili, F.^b, Teichmann, L.^b, Gärtner, G.^b, Ding, H.^b, Köhler, J.^b

^aGGL Geophysik und Geotechnik Leipzig GmbH, Bautzner Str. 67, 04347 Leipzig ^bBundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE), Eschenstraße 55, 31224 Peine

Key words: Asse, 3D-Seismik, Slip-Sweep-Verfahren, breitbandige Signale

Zusammenfassung

Für die Schachtanlage Asse II, in der von 1967 bis 1978 rund 126.000 Gebinde mit schwach- und mittelradioaktiven Abfällen eingelagert worden sind, wurde 2013 durch den Bundestag die Rückholung der eingelagerten Abfälle entschieden und gesetzlich verankert [1]. Ausgangspunkt aller dafür notwendigen Planungen und resultierenden Maßnahmen wie die Rückholung und die anschließende Stilllegung sowie alle erforderlichen Genehmigungen bildet eine belegbare und belastbare Beschreibung der vorliegenden geologischen und hydrogeologischen Situation. Eine solche Standortbeschreibung muss auf der gezielten Anwendung von Erkundungsmöglichkeiten basieren, die dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen.

Ein Baustein hierbei ist die von Oktober 2019 bis März 2020 durchgeführte hochauflösende 3Dseismische Messung. Ziele der 3D-Seismik sind die lagerichtige räumliche Abbildung der wesentlichen Strukturelemente des zentralen Bereichs der Salzstruktur Asse. Hierzu gehören die Salzumhüllende und der Salzspiegel ebenso wie die Erlangung von detaillierten Kenntnissen über den Aufbau des Deckgebirges sowie die großräumige Erfassung von Störungen und deren Charakterisierung.

Die Größe der Messfläche beträgt 36,5 km² und enthält nominell 40.860 Anregungspunkte, darunter knapp 16% Sprenganregungen, sowie 46.130 Empfangspunkte, was für 3D-seismische Messungen eine einzigartig hohe Punktdichte darstellt. Der Linienabstand für die Anregungs- und Empfangslinien beträgt 50 m bis 200 m, der Messpunktabstand einheitlich 10 m. Zur Abbildung der steilen Flanken der Salzstruktur sind große Offsets über 4 km notwendig.

Ein wichtiger und zeitintensiver Punkt in der Vorbereitung der 3D-Seismik stellte das Einholen von Betretungsgenehmigungen der überwiegend land- und forstwirtschaftlich genutzten Messfläche dar.

Die hohen Anforderungen an die Auflösung und Qualität der seismischen Daten erforderte den Einsatz der innovativsten seismischen Techniken wie Einzelvibratoren, Einzelgeophone und breitbandige Signale. Gleichzeitig war es aufgrund der landwirtschaftlichen Nutzung der Messfläche sowie der Berücksichtigung naturschutzrechtlicher Belange notwendig, die umfangreiche Messung in sehr kurzer Zeit durchzuführen. Die Energieanregung erfolgte daher im Slip-Sweep-Verfahren mit vier bis fünf an unterschiedlichen Stellen im Messgebiet arbeitenden Einzelvibratoren, die ein breitbandiges Signal abstrahlten. In den für die Vibrationsfahrzeuge nicht zugänglichen Waldgebieten wurden Sprengladungen in flachen Bohrungen zur Energieanregung eingesetzt. Die Aufzeichnung erfolgte mit einem kabellosen Messsystem und vertikalen 5 Hz-Einzelgeophonen.

Trotz der umfangreichen und schwierigen Bohrarbeiten für die Sprengseismik im Waldgebiet der Asse sowie der engen Zeitvorgaben für die Umsetzung des Messprogramms wurden die Feldarbeiten bereits Ende Februar 2020 vorfristig und unfallfrei abgeschlossen.

1. Einleitung

Die Schachtanlage Asse II ist ein altes Salzbergwerk bei Remlingen im Landkreis Wolfenbüttel, das von 1909 bis 1964 für die Gewinnung von Kali- und Steinsalz betrieben wurde. Im Zeitraum von 1967 bis 1978 wurden im Auftrag des Bundes rund 126.000 Gebinde mit schwach- und mittelradioaktiven Abfällen eingelagert (Abb. 1). Seit 1989 dringt Grundwasser in einer Tiefe zwischen 500 und 600 Metern in das Bergwerk ein. In 2013 wurde mit breiter politischer Mehrheit vom Bundestag die Rückholung der eingelagerten Abfälle gesetzlich festgeschrieben (§57b Abs. 8, Atomgesetz, [1]) und die BGE (ehemals BfS/Asse GmbH) mit der Umsetzung beauftragt. Ausgangspunkt aller für die Rückholung notwendigen Planungen und resultierenden Maßnahmen sowie der erforderlichen Genehmigungen bildet eine belegbare und belastbare Beschreibung der vorliegenden geologischen und hydrogeologischen Situation. Eine solche Standortbeschreibung muss auf der gezielten Anwendung von Erkundungsmöglichkeiten basieren, die dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen.

In Ergänzung zu weiteren laufenden und anstehenden Erkundungsmaßnahmen wurde von Oktober 2019 bis März 2020 eine hochauflösende 3D-seismische Messung durchgeführt. Ziele der 3D-Seismik sind die lagerichtige räumliche Abbildung der Salzumhüllenden und des Salzspiegels im zentralen Bereich der Salzstruktur, die Charakterisierung potentieller Migrationspfade von Lösungszutritten, die Erlangung von detaillierten Kenntnissen über den Aufbau des Deckgebirges, sowie die großräumige Erfassung die großräumige Erfassung von Störungen und deren Charakterisierung.



Figure 1: Liegend gestapelte Fässer in der Asse.

2. Der Umfang

2.1. Das Untersuchungsgebiet

Im Jahr 2013 wurden erste seismische Testmessungen durchgeführt, um zu klären, ob eine 3D-Seismik die Struktur der Asse und das Deckgebirge abbilden kann und welche Planungsparameter hierfür anzusetzen sind. Sie zeigten, dass eine seismische Abbildung des Untergrundes mit ausreichender Genauigkeit möglich ist [2]. Zusätzlich lieferten sie grundlegende Informationen zur Messanordnung der 3D-Seismik.

Das aktuelle Messgebiet umfasst eine Fläche von rund 36,5 km2 und erstreckt sich in Richtung Südwest-Nordost. Es schließt die Orte Wittmar, Remlingen, Groß Vahlberg, Mönchevahlberg, Weferlingen und Klein Biewende ein. Auch Teile von Dettum und Sottmar gehören dazu. Neben den bebauten Gebieten besteht das Untersuchungsgebiet hauptsächlich aus land- und forstwirtschaftlich genutzten Flächen. Im Zentrum der Messfläche befindet sich der markante Höhenzug der Asse mit teilweise steilen nach Südwesten und Nordosten einfallenden Flanken. Er erreicht Höhen über 220 m ü. NN und liegt damit ca. 80 m über dem südlichen Gelände und ca. 130 m über der nördlich liegenden Senke der Altenau. Die geologische Situation und die Abgrenzung des Deckgebirges zum Salinar bedingen eine Erkundungstiefe bis ungefähr 2.000 m (Abb. 2).



Figure 2: Liegend gestapelte Fässer in der Asse.

Als Spätfolge des Zweiten Weltkriegs war nicht auszuschließen, dass im Untersuchungsgebiet Kampfmittel gefunden werden. Aufgrund des engen seismischen Messrasters (s. Kap. 2.2) hätten diese eine Gefahr für Personal und Geräte darstellen können. Nach der Auswertung historischer Luftbilder ging die BGE davon aus, dass auf rund sechs Prozent der Fläche des Untersuchungsgebiets Kampfmittelaltlasten möglicherweise zu erwarten sind. In Vorbereitung der 3D-Seismik wurden daher mittels magnetischer Sondierungen 6.387 Bohransatzpunkte und ungefähr 115.000 m2 Fläche entlang der seismischen Anregungspunktlinien auf Kampfmittelaltlasten untersucht und freigegeben.

2.2. Das Messraster

Die Struktur der Asse mit ihren steil stehenden geologischen Einheiten (Abb. 2) erforderte eine sehr dichte räumliche Abtastung des seismischen Wellenfeldes. Gleichzeitig waren zur Abbildung der stark geneigten Schichten auch große Offsets notwendig. Für die 3D-Seismik wurde ein orthogonales Messraster gewählt, bei dem die Anregungspunktlinien aus operativen Gründen, aufgrund des Wegenetzes im Asse-Wald (überwiegend forstwirtschaftlich genutzte Rückewege), senkrecht zur Streichrichtung der Salzstruktur in etwa nordwest-südöstlicher Richtung verlaufen. Entsprechend waren die Empfangspunktlinien in südwest-nordöstlicher Richtung orientiert. Der Linienabstand des Messrasters war im Umfeld der Schachtanlage Asse II und entlang des Höhenzugs der Asse enger, um auch den Salzspiegel und flachere Strukturen des Deckgebirges zu erfassen, und vergrößerte sich zum Rand des Untersuchungsgebietes (Abb. 3). Tabelle 1 fasst die wichtigsten Messparameter zusammen.

Anregungslinienabstand	50 m, 100 m, 200 m
Empfangslinienabstand	50 m, 100 m
Anregungspunktabstand	10 m
Geophonabstand	10 m
Anzahl der aktiven Kanäle	
(feste Auslage, einmal versetzt)	ca. 40.000
Vibratortyp Hemi	50
Anzahl der Vibratoren	4-5 in Slip-Sweep-Technik
Sweepfrequenzen	$5-120~\mathrm{Hz}$
Sweeplänge	60 s
Energiestapelung	1
Aufzeichnungslänge	4 s
Samplerate	1 ms
Registriereinheiten (kabellos)	Innoseis Tremornet mit internen
	hoch empfindlichen 5 Hz-Geophonen

Table 1: Messparameter der 3D-Seismik.

Das theoretische orthogonale Messraster weist eine nominelle Anzahl von 40.860 Anregungspunkten auf. Davon konnten 36.137 (entspricht 88,4%) realisiert werden. 3.928 Anregungspunkte entfielen in Ortschaften aufgrund von Wasser- oder Gasleitungen oder Sicherheitsabständen zu Gebäuden und wegen Flächen ohne Betretungsgenehmigungen sowie nicht zugänglichen Schutzgebieten. Weitere 795 Anregungspunkte entfielen während der Produktion nach starken Regenfällen aufgrund von nicht mehr befahrbaren, nassen Feldern im Nordteil des Messgebiets. Zu einem kleinen Teil konnten Anregungen aufgrund von Ergebnissen der Erschütterungsmessungen in den Ortschaften nicht realisiert werden. Die 36.137 realisierten Anregungspunkte teilen sich auf in 29.773 Vibropunkte und 6.364 Sprengpunkte. Von nominell 46.130 Empfangspunkten konnten 44.677 (entspricht 96,9%) realisiert werden. 1.453 Anregungspunkte entfielen aufgrund von Flächen ohne Betretungsgenehmigungen.



Figure 3: Messraster der 3D-Seismik Asse mit Anregungs- (rot) und Empfangslinien (blau).

3. Der Ablauf

Um die 3D-Seismik erfolgreich durchführen zu können und die Einschränkungen für die Eigentümer und Nutzer der Messfläche so gering wie möglich zu halten, war ein sehr enger Zeitplan einzuhalten, der insbesondere eine extrem schnelle Messdurchführung erforderte. Um die für die Messung erforderlichen Betretungsgenehmigungen von den Eigentümern und Bewirtschaftern der land- und forstwirtschaftlichen Flächen im Messgebiet zu erhalten, war es eine Voraussetzung, dass die seismischen Messungen, inklusive ihrer vor- und nachbereitenden Arbeiten, ausschließlich im Zeitraum von Anfang Oktober 2019 bis Ende März 2020 durchgeführt werden. Daraus ergab sich folgender Ablauf:

Schritt 1: Informationsveranstaltungen (September 2018 – März 2020)

Bereits im September 2018 fanden erste Informationsveranstaltungen für Eigentümer und Bewirtschafter der land- und forstwirtschaftlichen Flächen im Messgebiet statt. Die Öffentlichkeit wurde im Oktober 2018 im Rahmen einer regelmäßig stattfindenden Veranstaltungsreihe zur Asse über das Seismik-Projekt informiert. Auch im Jahr 2019 wurden verschiedene Informationsveranstaltungen durchgeführt. Mit Beginn der Arbeiten im Oktober 2019 lud die BGE erneut die Öffentlichkeit zu einer Informationsveranstaltung in das Dorfgemeinschaftshaus in Remlingen ein, um über die Arbeiten in den kommenden Monaten zu berichten. Während der seismischen Messungen gab es einen Tag der Offenen Tür. Auf der Internetseite der BGE wurde außerdem ein Themenschwerpunkt mit zahlreichen Informationen zur 3D-Seismik eingerichtet. Unter anderem wurde dort auch wöchentlich der aktuelle Fortschritt der 3D-Seismik dargestellt.

Schritt 2: Einholen von Betretungserlaubnissen (November 2018 – September 2019)

Nachdem es gelungen war durch die extrem schnelle Messdurchführung eine generelle Akzeptanz der seismischen Messung bei den betroffenen Eigentümern und Bewirtschaftern der Flächen im Messgebiet zu erzeugen, erfolgte ab Ende 2018 die rechtliche Absicherung der 3D-Seismik. Mit den Eigentümern und Bewirtschaftern der land- und forstwirtschaftlichen Flächen wurden Gestattungsverträge für das Betreten und die Durchführung der notwendigen Arbeiten verhandelt und abgeschlossen. In den Ortschaften wurden von den Eigentümern die Betretungserlaubnisse zur Auslage der Registriereinheiten auf Privatgrundstücken eingeholt. Ein Sonderbetriebsplan zur Durchführung der 3D-Seismik wurde von der BGE erstellt und durch das zuständige Bergamt zugelassen.

Schritt 3: Vorbereitung der 3D-seismischen Messung (Oktober 2019 – Dezember 2019)

Im Zeitraum von Anfang Oktober bis Mitte Dezember 2019 erfolgten die wesentlichen vorbereitenden Arbeiten zur eigentlichen Messung der 3D-Seismik. Alle Empfangs- und Anregungspunkte wurden eingemessen, alle Bohransatzpunkte und einige Flächen entlang der vibroseismischen Anregungslinien auf Kampfmittelaltlasten untersucht, sowie seismische Nahlinien gemessen. Die Nahlinien dienen dazu, die Wellenausbreitungsgeschwindigkeiten in den oberflächennahen Schichten († 20 m) zu bestimmen, um in der folgenden Datenbearbeitung die statischen Korrekturen zu präzisieren. Darüber hinaus wurden zur Vorbereitung der Sprengseismik 6.387 Flachbohrungen abgeteuft und verrohrt. Bei der Positionierung dieser Bohrungen wurde berücksichtigt, dass der Höhenzug der Asse, abhängig von den ausstreichenden Schichten, von zahlreichen Erdfällen geprägt ist, in die nicht gebohrt werden durfte. Um die hohe Anzahl von Bohrungen in nur drei Monaten abzuteufen, wurden im Vorfeld Testbohrungen durchgeführt, um die einzusetzende Bohrtechnik und die notwendigen Ressourcen zu optimieren. Schlussendlich führte dies zum gleichzeitigen Einsatz von 17 Bohrcrews mit portablen und auf Traktoren montierten Bohrgeräten. Die Bohrungen sind notwendig, da die Vibrationsfahrzeuge im dicht bewachsenen und topografisch bewegten Waldgebiet nicht eingesetzt werden können, eine Anregung in dem Bereich jedoch unverzichtbar ist. Zum Schutz der Flora und Fauna erfolgte Planung und Umsetzung der Messung so, dass der Eingriff in die Natur minimiert wurde. Die Durchführung der Arbeiten erfolgte in enger Abstimmung mit einer ökologischen Baubegleitung.

Schritt 4: Vorbereitung der 3D-seismischen Messung (Januar 2020)

Von Anfang Januar 2020 bis Mitte Januar 2020 erfolgte die Auslage der ca. 40.000 Registriereinheiten sowie die Messung von vertikalen seismischen Profilen (VSP) in vier Tiefbohrungen. Außerdem wurde mit dem Laden der sprengseismischen Bohrungen begonnen. Die VSP-Messungen helfen, das Geschwindigkeitsmodell in dem durch die Bohrungen erfassten Bereich des Deckgebirges zu verbessern. Dieses Geschwindigkeitsmodell wird für die spätere Auswertung der 3D-seismischen Messdaten benötigt und verbessert insbesondere die Umrechnung der gemessenen seismischen Laufzeiten in Tiefenwerte.

Zur Bestimmung des optimalen Sweeps für die vibroseismische Anregung wurden Anfang Januar 2020 außerdem verschiedene Parametertests entlang einer separaten Empfangslinie durchgeführt. Die Optimierung der Bohrteufen und die Bestimmung der notwendigen Ladungsmenge für die Sprengseismik erfolgte anhand mehrerer Tests bereits Anfang Oktober 2019.

Schritt 5: Durchführung der 3D-seismischen Messung (Januar 2020 – Februar 2020)

Am 17. Januar 2020 begann die eigentlich 3D-seismische Messung mit 4 bis 5 Vibrofahrzeugen und der Sprengseismik. Die Messungen konnten mit 29.773 realisierten Vibropunkten und 6.364 realisierten Sprengpunkten bereits am 20. Februar 2020 nach 35 Messtagen abgeschlossen werden. Die gesamte Messauslage wurde dann bis Ende Februar 2020 wieder abgebaut und die seismischen Daten aus den Registriereinheiten ausgelesen. Ergänzend wurden auch 24 kabellose Registriereinheiten unter Tage in der Schachtanlage platziert, die während der 3D-Seismik alle Anregungen an der Erdoberfläche mitregistrierten.

Schritt 6: Nachbereitung (März 2020)

Im März erfolgen dann mit Eigentümern und Bewirtschaftern der land- und forstwirtschaftlichen Flächen unter Hinzuziehung eines Gutachters gemeinsame Begehungen zur Regulierung von Flurschäden.

Schritt 7: Aufbereitung, Zusammenstellung und Dokumentation der Messdaten (März 2020 – Mai 2020)

Die Aufbereitung und Zusammenstellung der Messdaten sowie die Dokumentation der Messungen erfolgt von März bis Mai 2020. Die Aufbereitung der Messdaten beinhaltet u.a. das Ausschneiden der spreng- und vibroseismischen Signale aus dem täglich registrierten Datenstrom der einzelnen Registriereinheiten, die Korrelation der vibroseismischen Signale, die Unterdrückung von harmonischem Noise, das Anbringen und Kontrollieren der Messgeometrie sowie das Archivieren der Datensätze auf Bändern. Die Daten stehen dann für die folgende Datenbearbeitung und geologische Interpretation zur Verfügung.

4. Die Sicherheit

Die BGE war bestrebt nachteilige Auswirkungen auf Mensch und Natur sowie auf die betriebswirtschaftliche Nutzung der forst- und landwirtschaftlichen Flächen so gering wie möglich zu halten. Grundlage dazu war ein umfassendes und laufend überprüftes HSE-Konzept (Health, Safety, Environment) zu dem beispielsweise folgende Maßnahmen gehörten:

Wirtschaftliche Nutzung weiter ermöglichen

Die Messungen der 3D-Seismik wurden im Januar/Februar 2020 durchgeführt. Vorbereitende Arbeiten begannen im Oktober 2019, nachbereitende Arbeiten erfolgten im März 2020. Dadurch blieb die Bewirtschaftung landwirtschaftlicher Flächen weitgehend möglich.

Unweltschutz

Innerhalb des Messzeitraums war eine ökologische Baubegleitung vor Ort. Ziel war es, die Auswirkungen der seismischen Messungen auf die Umwelt so gering wie möglich zu halten. Auch die Regelungen zum Messzeitraum und einzelne Beschränkungen bei der Erzeugung der seismischen Wellen tragen den Aspekten des Umwelt- und Naturschutzes Rechnung. So wurde etwa die Erzeugung von seismischen Wellen in den Brutzeiten selten vorkommender Vogelarten vermieden.

Beschränkungen bei der Erzeugung von seismischen Wellen

Für den Einsatz der Technik zur Erzeugung der seismischen Wellen galten verschiedene Vorgaben. So wurde zum Beispiel festgelegt, welche Gebiete durch Vibrations- und Bohrfahrzeugen nicht befahren werden dürfen. Bei Bedarf musste die eingesetzte Bohrausrüstung per Hand in das Gelände getragen werden. Um Schäden durch Erschütterungen zu vermeiden, wurden in den Ortschaften, in der Nähe von erschütterungsempfindlichen Bauten (gilt auch für Wasser- und Gasleitungen) und auf dem Betriebsgelände der Schachtanlage Asse II begleitende Erschütterungsmessungen durchgeführt. Die Kraft des Vibrationsfahrzeugs oder die Menge des einzusetzenden Sprengstoffs wurde in diesen Bereich reduziert.

Konnte eine Uberschreitung der Anhaltswerte für zulässige Erschütterungen (Schwinggeschwindigkeiten) dennoch nicht ausgeschlossen werden, wurde der jeweilige Anregungspunkt ausgelassen. Weiterhin galten für die Erzeugung der seismischen Wellen zeitliche Beschränkungen. Die Feldarbeiten fanden ausschließlich werktags in der Zeit von 06:00 Uhr bis 22:00 Uhr statt. Nur in begründeten Ausnahmefällen durften Vibrationsfahrzeuge auch am Sonntag zum Einsatz kommen, nicht jedoch in der Nähe von Ortschaften. Sprengungen waren sonntags generell verboten. Um die Belastung für Anwohnerinnen und Anwohner zusätzlich zu reduzieren, durften die Bohr- und Sprengarbeiten in der Nähe von Ortschaften nur bei Tageslicht vorgenommen werden. Auch gelten Grenzwerte für die Lärmbelastung.

Verkehrssicherheit

Während der seismischen Messungen bewegten sich an verschiedenen Stellen des Untersuchungsgebietes mehrere Vibrofahrzeuge unabhängig voneinander über Felder, Wege und Straßen. Auf Straßen wurden die Vibrofahrzeuge, vergleichbar zu einer Wanderbaustelle, durch ein Sicherungsfahrzeug mit Warntafel sowie eine entsprechende Beschilderung abgesichert. Darüber hinaus waren auch spezielle Reinigungsfahrzeuge im Einsatz, um eventuelle Verschmutzungen von Straßen durch die Messfahrzeuge unverzüglich zu beseitigen.

Schadensausgleich

Sollten trotz aller Vorsichtsmaßnahmen durch die 3D-Seismik Schäden aufgetreten sein, werden diese unter Hinzuziehung eines Sachverständigen durch die BGE reguliert. Solche Schäden werden jeweils im Einzelfall betrachtet, und ohne Verzug beseitigt, oder es wird nach vorheriger Vereinbarung mit dem Eigentümer der betroffenen Fläche eine Ersatzleistung erbracht.

5. Die Technik

5.1. Die Sprengseismik

In den für die Vibrationsfahrzeuge nicht zugänglichen Waldgebieten wurden Sprengladungen in flachen Bohrungen zur Energieanregung eingesetzt. Insgesamt wurden für die Sprengseismik 6.387 Bohrungen mit Tiefen zwischen 6 m und 15 m im Trockenbohrverfahren abgeteuft und temporär verrohrt. Davon konnten 6.364 Bohrungen mit Ladungsmengen bis zu 970 g geladen, mit Bentonit verfüllt und gezündet werden.

5.2. Die Vibroseismik

Die hohen Anforderungen an die Auflösung und Qualität der seismischen Daten sowie die Notwendigkeit die umfangreiche Messung in sehr kurzer Zeit durchzuführen erforderten den Einsatz der innovativsten seismischen Techniken wie:

- Einzelgeophone, Einzelvibratoren
- Kabelloses Messsystem
- Breitbandige Signale
- Slip-Sweep-Verfahren

5.2.1. Einzelgeophone, Einzelvibratoren

Die Messung der 3D-Seismik Asse erfolgte sowohl mit Einzelgeophonen als auch mit Einzelvibratoren. Für reflexionsseismische Untersuchungen mit größeren Erkundungstiefen (> 1.000 m) ist die Verwendung von Geophongruppen mit seriell und parallel geschalteten Geophonen eine anerkannte Regel der Technik. Solche Geophongruppen sind in der Lage, die Dynamik der Signalaufzeichnung an einem Empfängerpunkt zu verbessern, da sie inkohärentes (Umgebungs-)Rauschen reduzieren. Zur gezielten Rauschunterdrückung werden Geophongruppen in einem bestimmten Muster (Array) ausgelegt, wobei die Größe des Array und die Anzahl der Geophone so berechnet sind, dass die Wellenlänge von Oberflächenwellen oder anderen kohärenten Störsignalen korrekt abgetastet wird. Nachteile der Geophongruppen können eine Signalverzerrung aufgrund von Höhenunterschieden innerhalb des Arrays (Intra-Array-Statik) und ein starker winkelabhängiger Filtereffekt sein. Aufgrund der technischen Entwicklung der seismischen Messapparaturen in den letzten Jahren ist es nun möglich, eine hohe Anzahl von Kanälen (> 10.000) zu verwenden, was den Einsatz von Einzelgeophonen für die Erfassung seismischer Daten möglich macht. Einzelgeophone weisen nicht die Nachteile von Geophongruppen (Winkelabhängigkeit, Intra-Array-Statik) auf. Allerdings sind bei der Verwendung von Einzelgeophonen im Vergleich zu Geophongruppen kleinere Abstände zwischen den Empfangspunkten notwendig, um eine ausreichende räumliche Abtastung des Wellenfeldes zu gewährleisten und entsprechende Filter (z.B. zur Unterdrückung von Oberflächenwellen) bei der Datenverarbeitung anwenden zu können, was bei der 3D-Seismik Asse mit Punktabständen von 10 m gewährleistet ist.

Das Hauptziel der Verwendung von Einzelgeophonen ist die Aufzeichnung eines möglichst hochfrequenten und breitbandigen seismischen Signals, da dies auch die Auflösung der seismischen Abbildung verbessert. Folglich sollte dies auch zum Einsatz von Einzelvibratoren bei der Erzeugung seismischer Wellen führen, da Vibratorgruppen oder mit Vibratorgruppen gefahrene Muster (Pattern) ebenfalls eine winkelabhängige Filterwirkung haben und somit die Bandbreite begrenzen.

Nachteil der Erzeugung seismischer Wellen mit Einzelvibratoren und der Aufnahme mit Einzelgeophonen ist die geringe Energieabgabe bzw. der geringe Energieempfang im Vergleich zu herkömmlichen Vibratorgruppen und Geophongruppen. Dies wird hier im Wesentlichen durch einen hohen Überdeckungsgrad kompensiert. Außerdem erwies sich bereits bei den Testmessungen 2013 die Energie eines Einzelvibrators als ausreichend für die Erkundungstiefe.

5.2.2. Kabelloses Messsystem

In den letzten Jahren haben die Speicherkapazität und die Laufzeit der internen Akkus der kabellosen Registriereinheiten stark zugenommen, so dass die seismischen Daten mittlerweile über mehrere Wochen ohne Unterbrechung aufgezeichnet werden können. Die hier verwendeten Registriereinheiten Innoseis Tremornet verfügen über eine Speicherkapazität von 8 bzw. 16 GigaByte und weisen eine Akkulaufzeit von mehr als 50 Tagen bei dauerhaftem Betrieb (24 Stunden pro Tag, 7 Tage die Woche) auf. Das Risiko von Datenverlusten durch technische Defekte ist nach Angaben des Herstellers sehr gering (Ausfallrate < 0.1%). Natürlich bleibt das Risiko eines vollständigen Datenverlusts durch den Diebstahl kabelloser Registriereinheiten bestehen.

Das Herunterladen der seismischen Daten von den kabellosen Registriereinheiten erfolgte üblicherweise beim Austausch der Registriereinheiten, wenn dies aufgrund des Endes der Akkulaufzeit oder wegen eines Defekts oder beim Versetzen der Registriereinheiten notwendig wurde, und natürlich am Ende der Messung. In diesem Zusammenhang muss darauf hingewiesen werden, dass je nach gewählter Dauer der autonomen Registrierung, dies bedeutet, dass es in diesem Zeitraum nahezu keine Möglichkeit gibt, die seismischen Daten einzusehen oder zu kontrollieren. Um dennoch eine Qualitätskontrolle der seismischen Daten zu ermöglichen, wurde bei der 3D-Seismik Asse eine separate Kontrolllinie mit 40 kabellosen Registriereinheiten aufgebaut, die an den ersten 10 Messtagen täglich ausgelesen und deren Messdaten überprüft wurden. Der Status einer Registriereinheit (z.B. noch vorhandene Speicherkapazität oder Akkulaufzeit) und des Geophons (z.B. Neigung, Noise) kann überprüft werden, wenn das System mit einer entsprechenden Wifi- oder Bluetooth-Schnittstelle ausgestattet ist. Dieser Test ist jedoch relativ zeitaufwendig und kann deshalb nicht jeden Tag für alle Sensoren durchgeführt werden. Bei der 3D-Seismik Asse wurde täglich mindestes ein Drittel der Auslage von ca. 40.000 Registriereinheiten überprüft.

Im Vergleich zu kabelgebundenen Messsystemen ermöglichen die drahtlosen seismischen Registriereinheiten eine höhere Produktivität. Die Datenübertragungszeiten, die Rechen- und Speicherzeiten sowie die Zeiten für Instrumenten- und Geophontests fallen weg. Die größte Produktivitätssteigerung ergibt sich jedoch daraus, dass die Prüfung (Line Check) und der Austausch von Kabeln während der Messung nicht mehr notwendig ist. Unter Berücksichtigung der gleichen Aufzeichnungsparameter (d.h. gleicher Anregungspunktabstand, gleiche Anzahl von Vibratoren, gleiche Sweeplänge und gleiche Anzahl von Sweeps) kann ein kabelloses Messsystem die Produktivität im Vergleich zu kabelgebundenen Messsystemen etwa verdoppeln.

5.2.3. Breitbandige Signale

Bei der Verwendung von Einzelgeophonen und Einzelvibratoren, die auch den Hochfrequenzanteil erhalten sollen, liegt es auf der Hand, eine möglichst große Bandbreite zu verwenden, um die seismische Auflösung weiter zu erhöhen. Da hohe Frequenzen bei der Wellenausbreitung relativ schnell gedämpft werden, ist es sinnvoll, insbesondere niedrige Frequenzen (< 10 Hz) zu erzeugen, um die Bandbreite zu erhöhen. Mit einem Sweep über mehr als 4 Oktaven (5 – 120 Hz), der hinsichtlich seiner Startfrequenz von 5 Hz auch auf die Eigenfrequenz der eingesetzten Geophone abgestimmt ist, wurde dies bei der 3D-Seismik Asse gewährleistet. Ein weiterer Vorteil der niedrigen Frequenzen ist auch, dass die Erkundungstiefe erhöht wird.

5.2.4. Slip-Sweep-Verfahren

Das Slip-Sweep-Verfahren erhöht die Produktivität einer seismischen Untersuchung erheblich, da sich die Sweeps verschiedener unabhängig voneinander arbeitender Vibratoren, die im Untersuchungsgebiet verteilt sind, zeitlich überlappen können (Abb. 4). Der Nachteil dieser Technik besteht darin, dass von der seismischen Quelle erzeugte Oberschwingungen sich mit der Grundmode des vorhergehenden Sweeps überlagern, was nach der Korrelation zu einem sogenannten harmonischen Rauschen (Harmonic Noise) führt und bei der Datenaufbereitung bzw. Datenbearbeitung ggf. zu unterdrücken ist.



Figure 4: Überlappende Sweeps im Slip-Sweep-Verfahren mit 4 Vibratoren.

Für die 3D-Seismik Asse wurde bei einer Sweeplänge von 60 s die Slip-Zeit zu 26 s gewählt, damit sich die 1. Oberschwingung erst bei Frequenzen von 90 Hz bis über 100 Hz, die weitestgehend außerhalb des Frequenzbereichs der Nutzsignale liegen, mit der Grundmode des vorhergehenden Sweeps überlagert (Abb. 5).



Figure 5: Grundmode des Sweeps (schwarze Linie), Oberschwingungen des Sweeps (blaue, grüne, rote Linien) und Registrierzeit (gelbe Fläche) im Frequenz-Zeit-Diagramm vor der Korrelation (links) und nach der Korrelation (rechts). Der vorhergehende Sweep wird von den Oberschwingungen des nachfolgende Sweeps überlagert.

Die Kombination von kabellosen Registriereinheiten mit der Anregung seismischer Wellen im Slip-Sweep-Verfahren verkürzt die Zeit für die Erfassung seismischer Daten drastisch. Vor dem Hintergrund der zeitlichen Limitierung durch die Nutzung der land- und forstwirtschaftlichen Flächen im Messgebiet hat diese Kombination die Durchführung der 3D-Seismik Asse erst möglich gemacht. Beispielsweise konnten beim Einsatz von 5 Vibrofahrzeugen im Maximum 1899 Vibropunkte pro Tag erzielt werden. Im Durchschnitt lag die Produktivität bei 1032 vibro- und sprengseismischen Anregungen pro Tag.

6. Danksagung

Die Autoren danken dem gesamten 3D-Seismik Team der Asse für die Zusammenarbeit und Unterstützung. Besonderer Dank gilt der Firma Geofizyka Torun, die die 3D-Seismik mit großem Engagement, hoher Qualität und unter Einhaltung des engen Zeitplans zuverlässig durchgeführt hat.

References

- AtG Atomgesetz: Gesetz über die friedliche Verwendung der Kernenergie und den Schutz gegen ihre Gefahren, § 57b Betrieb und Stilllegung der Schachtanlage Asse II.
- [2] [2] DMT Petrologic GmbH (2014): Datenbearbeitung, Interpretation und Modellrechnungen einer (3D-)seismischen Testmessung im Bereich der Schachtanlage Asse II. Bundesamt für Strahlenschutz.

Seismische Datenbearbeitung: Ein Schlüssel zur Standortauswahl

M. Scholze^a, H. Ding^a

^aBundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE)

Key words: Datenbearbeitung, Reprozessierung, 2D-Seismik, 3D-Seismik, Asse, Morsleben

1. Einleitung

Seit rund 100 Jahren werden in Deutschland seismische Messungen durchgeführt. Zunächst wurden vor allem refraktionsseismische Messungen nach dem Verfahren von Ludger Mintrop aufgezeichnet, später auch reflexionsseismische Messungen, die heute den Standard für die Exploration des tiefen Untergrundes darstellen. Die vorhandenen seismischen Messdaten wurden konzentriert in rohstoffhöffigen Gebieten erhoben. Diese sind vor allem das, im Rahmen der Kohlenwasserstoffexploration viel untersuchte, südliche Permbecken im Norden Deutschlands sowie der Oberrheingraben und die Molasse, die beide sowohl zur Exploration von Kohlenwasserstoffen wie auch von tiefer Erdwärme untersucht wurden. Abbildung 1 zeigt diese Konzentration seismischer Erkundungen sehr deutlich. Die Karte zeigt aber auch, dass für einen Großteil Deutschlands keine geophysikalischen Kenntnisse in Form seismischer Messdaten vorliegen. Neben dieser quantitativen Konzentration seismischer Erkundungen auf regionale Gebiete ist zudem eine qualitative Differenzierung der durchgeführten seismischen Erkundungen erforderlich. Viele Messungen in den letzten 100 Jahren lieferten nach heutiger Bewertung keine ausreichend verlässlichen Ergebnisse. Viele in der Vergangenheit realisierten Messgeometrien sind aus heutiger Sicht, insbesondere bezüglich der hohen Anforderungen der Endlagersuche, als nicht ausreichend zu bewerten, da mit zu großen Messpunktabständen, zu geringen Aufstellungsweiten und zu geringer Überdeckung gemessen wurde. Darüber hinaus wurden die Daten erst ab den 1960er Jahren auf Magnetbänder geschrieben. Alle zuvor aufgezeichneten Daten sind – wenn überhaupt – als Papierabspielungen erhalten geblieben. Das Vorhandensein von Rohdaten ermöglicht heute eine Validierung der Ergebnisse durch Reprozessierung (Neubearbeitung anhand der weiter entwickelten Abbildungs- und Bearbeitungsverfahren) der Daten.



Figure 1: Durchgeführte seismische Messungen in Deutschland (Stand 2019): A) 3D-Seismik B) 2D-Seismik. Messungen aus dem Gebiet der ehem. DDR sind teilweise nicht aufgeführt [1]

Aufgezeichnete seismische Daten werden in Deutschland nicht zentral gesammelt, sondern von den Eigentümern (Firmen und Anstalten) archiviert. Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass die Rohdaten und Ergebnisse einzelner 2D-Seismik-Messungen früheren Datums nicht mehr vorhanden oder

Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021

auffindbar sind. Im Gegensatz hierzu ist jedoch zu vermuten, dass die Rohdaten der 3D-Seismik-Messungen bei den Eigentümern noch vorhanden und bearbeitbar sind, da diese Messdaten jüngeren Datums sind. Trotz dieser Einschränkungen stellen sämtliche seismische Messdaten einen wertvollen Datenbestand dar und sollten im Zuge der Endlagersuche berücksichtigt werden. Ein Vergleich der Karten der durchgeführten seismischen Messungen aus Abbildung 1 mit der Karte der Teilgebiete gemäß §13 Standortauswahlgesetz in Abbildung 2 zeigt, dass z. B. die niedersächsischen Teilgebiete des Tertiären und Prätertiären Tongesteins sowie des Steinsalzes in steiler Lagerung in weiten Teilen mit bereits gemessener 2D- und 3D-Seismik überdeckt sind. Eine weiterführende Bewertung dieser Teilgebiete kann damit womöglich auch mit bereits gemessenen Seismik-Messdaten unter Einbeziehung weiterentwickelter Bearbeitungsverfahren geschehen.



Figure 2: Die Teilgebiete gemäß §13 Standortauswahlgesetz aus dem Zwischenbericht Teilgebiete [2]

Die Möglichkeiten der Datenbearbeitung neuer und bestehender seismischer Messungen werden an zwei Beispielen demonstriert. Die Datenbearbeitung der 3D-Seismik Asse 2020 zeigt die Möglichkeiten einer modernen Messung mit sehr dichter Messgeometrie. Anhand der 2D-Seismik-Messdaten über dem Endlager Morsleben von 1994 wird gezeigt, welcher Mehrwert durch eine zeitgemäße Neubearbeitung erzielt werden kann.

2. 3D-Seismik Asse 2020

Anfang 2020 wurde im Bereich des Höhenzugs Asse eine 3D-seismische Messung durchgeführt. Die Ziele waren die lagerichtige räumliche Abbildung der Salzumhüllenden und des Salzspiegels im zentralen Bereich der Salzstruktur der Asse, die Charakterisierung potentieller Migrationspfade von Lösungszutritten, die Erlangung von detaillierten Kenntnissen über den Aufbau des Deckgebirges, sowie die großräumige Erfassung von Störungen und deren Charakterisierung [3].

Durch die flache Lage des Salzspiegels und des Gipshutkomplexes sowie die hohe Komplexität der Sedimentflanken war eine sehr dichte Messkonfiguration notwendig. Die 3D-Seismik Asse stellt die dichteste 3D-seismische Messung in Europa dar. Aus den im Feld aufgezeichneten Rohdaten wird durch die Datenbearbeitung, unter Verwendung spezieller Bearbeitungs- und Abbildungsverfahren, ein 3D-seismisches Abbild des Untergrunds unter und im Bereich der Asse produziert. Durch die hohe Messdichte sind die 3D-Seismik-Abbilder sehr hoch aufgelöst, sauber und zeigen auch intra-salinar Strukturen. Ferner können durch spezielle Auswertungen wie die Refraktionsgeschwindigkeitsanalyse oder die Ersteinsatztomographie hochaufgelöste Charakterisierungen der oberflächennahen Geologie berechnet werden. Abbildung 3 zeigt die Ergebnisse einer ersten Refraktionsgeschwindigkeitsanalyse des 3D-Seismik-Datensatzes



Figure 3: 3D-Seismik Asse 2020 - Geschwindigkeit der oberflächennahen Schicht (bestimmt über eine Refraktoranalyse)

Asse. Die Härtlinge des Muschelkalks sind durch ihre relativ hohe Geschwindigkeit gut zu erkennen, auch quartäre Ablagerungen sind durch ihre geringe Geschwindigkeit gut zu identifizieren. Die Methode liefert zudem vertikale Mächtigkeitskarten für diese Schichten, sodass in anderen Gebieten auch etwaige Quartärrinnen in Breite und Tiefe bestimmt werden könnten.



Figure 4: 3D-Seismik Asse 2020, Zwischenergebnis: Schnitt östlich des Grubengebäudes, rot: Verläufe über – und untertägiger Bohrungen, grün: durch eine Erkundungsbohrung durchörterter Bereich des Hauptanhydrits

Die zurzeit vorliegenden Zwischenergebnisse der 3D-Seismik-Daten Asse in Form einer 3D-Post-Stack-Zeit-Migration zeigen bereits umfangreiche Detailinformationen. In Abbildung 4 ist ein Süd-Nord-Schnitt durch das Zwischenergebnis der Zeitbearbeitung zu sehen. Der starke Reflektor im unteren Bereich der Bildmitte kann unter Zuhilfenahme der Daten einer Erkundungsbohrung interpretiert werden. Die Bohrung hat an dieser Stelle den Hauptanhydrit aufgeschlossen. Der Verlauf des Hauptanhydrits kann durch die 3D-Seismik räumlich erfasst und kartiert werden.

Die weitere Datenbearbeitung umfasst die Geschwindigkeitsmodellierung in Tiefe sowie die Tiefenabbildung der Seismik durch verschiedene Abbildungsverfahren. Durch die Anwendung dieser Verfahren wird eine lagerichtige Positionierung der Reflektoren gewährleistet. Die ersten belastbaren Ergebnisse nach verschieden Tiefenmigrationen werden im 3. Quartal 2021 erwartet.

3. 2D-Seismik Morsleben 1994

Über dem Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben wurden 1994 2D-Seismik-Messungen durchgeführt. Das Endlager befindet sich in der Salzstruktur des Oberen Allertals. Eine Flachseismik sollte die Bereiche oberhalb der Salzstruktur bis zum Salz erkunden, wohingegen eine Tiefseismik mit Profilen über Teilen der Lappwald-Scholle, des Allertals sowie der Weferlinger Triasplatte die Strukturen bis zur Zechsteinbasis erkunden sollte [4]. Im Rahmen eines BGE-internen Tests wurden Linien beider Messungen neubearbeitet. Die Flachseismik wurde mit sehr kurzen Auslagen aufgezeichnet, methodenbedingt ist die Abbildung steiler Strukturen daher nicht möglich und die Ergebnisse sind somit nicht eindeutig interpretierbar. Eine Neubearbeitung der Tiefseismik-Profile zeigt starke Verbesserungen im Vergleich zur ursprünglichen Bearbeitung von 1994. Abbildung 5 zeigt den Vergleich zwischen dem Ergebnis der ursprünglichen Datenbearbeitung von 1994 sowie dem Ergebnis der BGE-Neubearbeitung von 2020. Die Ränder der Salzstruktur sind durch verbesserte Abbildungsverfahren, wie der Kirchhoff-Pre-Stack-Zeit-Migration, nun direkt abgebildet worden, sodass der Salzkörper zuverlässiger interpretiert und charakterisiert werden kann. Darüber hinaus ist die Neubearbeitung durch neue Methoden der Rauschunterdrückung signifikant sauberer, verfügt daher über ein besseres Signal-Rausch-Verhältnis, was die Interpretation vereinfacht. Auch die oberflächennahen Bereiche der Tiefseismik sind in der Neubearbeitung sauberer und klarer abgebildet.



Figure 5: Vergleich eines Morsleben 2D-Seismik-Profils der Tiefseismik-Messung 1994 A) nach der Datenbearbeitung von 1994 sowie B) nach BGE-Neubearbeitung 2020. Rote Pfeile zeigen die Position der die Salzstruktur begrenzenden Flanken in der Neubearbeitung

4. Zusammenfassung

Die Zwischenergebnisse der Datenbearbeitung der 3D-Seismik Asse 2020 zeigen, dass eine moderne hochauflösende 3D-seismische Messung nicht nur qualitativ hochwertige 3D-Abbilder des Untergrundes produziert, sondern auch für eine Interpretation wertvolle Begleitprodukte liefert, wie die hier gezeigte Charakterisierung der oberflächennahen Geologie durch die Refraktionsgeschwindigkeitsanalyse. Zudem wurde gezeigt, dass die 3D-Seismik Asse u.a. auch intra-salinar Strukturen abbilden kann. Dies geht deutlich über die zu Beginn der Messung definierte Zielstellung hinaus. Es besteht damit auch bei zukünftigen 3D-seismischen Messungen die Möglichkeit, bei Wahl einer geeigneten Messkonfiguration, auch den internen Aufbau einer Salzstruktur übertägig zu erkunden.

Die Ergebnisse der Neubearbeitung der 2D-Seismik-Morsleben-Profile aus 1994 zeigen, dass eine Reprozessierung älterer Messdaten, entsprechend heute aktuellem Stand von Wissenschaft und Technik, zu einer deutlichen Verbesserung in Interpretation und Aussagekraft führen kann. Eine Neubearbeitung von bestehenden seismischen Messdaten über ausgewählten Erkundungsgebieten könnte einen beachtlichen Mehrwert erzielen. Die Neubearbeitung von 2D-/3D-seismischen Daten sollte auch unter Berücksichtigung der Datenbeschaffung deutlich schneller und kostengünstiger möglich sein als eine Neumessung.

References

- [1] GEOTIS Geothermisches Informationssystem, Karte Geophysik, 2D- und 3D-Seismik, LIAG (2020)
- [2] Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH, Zwischenbericht Teilgebiete, Teilgebiete Karte Format A4 (2020)
 [3] Schuck, Bilgili, Teichmann, Gärtner, Ding, Köhler, Vorbereitung und Durchführung der 3D-Seismik, DGG Jahrestagung (2020)
- [4] Best, Zirngast, Die strukturelle Entwicklung der exhumierten Salzstruktur "Oberes Allertal", BGR (2002)

How to use AI-based algorithms for identification and evaluation of nuclear waste disposal sites

Andreas Brosiga, Andreas Bartha, Andreas Knoblocha, Peggy Hielschera, Nils Hothb Klaus Peter Stanekb

^aBeak Consultants GmbH, Freiberg ^bTechnische Universität Bergakademie Freiberg, Freiberg

Key words: Artificial Neural Networks, pattern recognition, nuclear waste disposal sites, faults, natural barriers, advangeo

1 Introduction

The German nuclear waste disposal site identification process is marked by a step by step approach: First generally suitable areas, marked by the presence of certain geological formations in the underground, and areas blocked by certain disqualifiers, are identified. At the same time the remaining potentially positive territories are ranked according to their suitability considering further weighting criteria. While in most cases there is sufficient knowledge for the identification of positive areas, and areas blocked by several disqualifiers (e.g. seismic and volcanic regions), other criteria, like active fault systems, are sometimes very



hard to identify. In many cases the level of knowledge is simply not sufficient for their correct identification and evaluation.

The further evaluation of potentially positive areas and their narrowing down to single sites and recommendation for further processing require a very careful and as far as possible non-destructive investigation. Especially the so-called hybrid approaches (Figure 1) combining both data-driven predictions and knowledge-based analysis provide best possible results [1]. This approach is able to transfer existing knowledge and empiric models into areas / 3D spaces with less knowledge and data coverage.

Figure 1: Data driven, knowledge-based and hybrid approaches

2 Status of AI applications in geo-sciences

In the last years, the applicability of AI methods for solving geoscientific tasks developed strongly [0].



Methods were implemented for the creation of geological and soil maps, the interpretation of remote sensing data, the identification of exploration targets (Figure 2), the estimation of mineral resources[2][4], the identification of geo-hazard prone areas (landslides, mudflows, soil creeping), and the identification of lineaments and ring structures.

As an example, the favourability of large rock volumes for the formation of skarn deposits was estimated by transferring the existing knowledge from one 3D space with well-known spatial relationships, faults systems and lithological properties to a large unknown space (Figure 4). Depending on the existing data, ANN cover the prediction of qualitative parameters (how similar is an unknown site to the training area/space) and qualitative parameters (e.g. prediction of grades of metals in ores) in unknown areas/spaces. Figure 2: Work flow of AI based mineral occurrence potential mapping, implemented in advangeo® Prediction Software

3 Identification and evaluation of disqualifying and weighting criterions



As the spatial knowledge regarding several disqualifying and weighting criterions is very different from place to place, known empiric dependencies and existing controlling data can be used to fill data gaps in unknown areas/ spaces. A good example is the identification of recently active faults and potentially active faults by using geomorphological criteria [5] and other relevant data (Figure 3). The semi-automatic identification of even very subtle geomorphological scarps and their classification into man-made and natural structures will support the classification of the entire German territory into suitable and unsuitable areas regarding the criteria "active faults" and "fault systems".

Figure 3: Identification of neotectonics using high resolution elevation models

4 Modelling of physical and chemical rock properties in 3D spaces

After the identification of potentially suitable areas in the 2D space, a 3D site evaluation is required. Here,



key rock parameters (like permeability and heat conductivity) have to be extrapolated / interpolated using few existing data points (bore holes, shafts, etc.). As the space of the future storage site must be kept as untouched as possible, the use of AI based technologies is simply without alternative. Here, geophysical 3D data will obviously be used as controlling parameters, together with 3D rock models, and 2D surfaces (e.g. fault systems) to fill the data gaps in the 3D space (Figure 4).

Figure 4: Identification of 3D mineral potentials using various rock properties

5 Conclusions

AI methods will find their definitive place in the entire chain of data collection, data gap filling and decision-making processes of the nuclear waste disposal site selection and evaluation process. They will support a maximally objective site selection process and preserve the spatial integrity of the potential disposal sites. The technologies are ready for their test and application.

References

[1] Barth, A., et al: Mineral predictive mapping - from intuition to quantitative hybrid 3D modelling. Paper and abstract at the conference: Mineral Prospectivity, current approaches and future innovations – BRGM. Orléans, France, 24-26 October (2017)

[2] Knobloch, A., et al.: Predictive Mapping of the Nodule Abundance and Mineral Resource Estimation in the Clarion-Clipperton Zone Using Artificial Neural Networks and Classical Geostatistical Methods. In: Deep-sea mining: resource potential, technical and environmental considerations. Ed: Rahul Sharma, Springer Verlag. (2016).

[3] Barth A., et al.: Neural network based spatial modeling of natural phenomena and events. In: Khosrow-Pour M (ed): Systems and software development, modeling, and analysis: new perspectives and methodologies. IGI Global, p 186–211. (2014)

[4] Brosig, A., et al.: Rohstoffprognosen für Zinn, Wolfram, Fluss- und Schwerspat im Mittelerzgebirge. In: Bergbaumonografie. Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie. Oberbergamt Sachsen. Freiberg. (2020)

[5] Andreani, L., Stanek, K.P, et al: (2014): DEM-Based Analysis of Interactions between Tectonics and Landscapes in the Ore Mountains and Eger Rift (East Germany and NW Czech Republic). - Remote Sens., 6, 7971-8001; doi:10.3390/rs6097971 (2014)

Ultraschallprüfung von Verschlussbauwerken im Salinar

E. Niederleithinger^a, F. Mielentz^a, U. Effner^a, H. Stolpe^a, T. Oesch^a, P. Prabhkara^a

^aBundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin

Key words: Verschlussbauwerk, Salzbeton, Ultraschall

1. Einführung

Zu jedem Endlager gehört die Entwicklung eines Verschlusskonzept. Im Endlager Morsleben und an anderer Stelle werden in Abhängigkeit vom Wirtsgestein verschiedene Materialien und Bauweisen für Streckenverschlüsse entwickelt und in großem Maßstab erprobt. Hierzu gehören auch Maßnahmen der Qualitätssicherung, die Informationen über Ausführung und Zustand der Versuchsbauwerke liefern. Hierzu werden von der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) für verschiedene Forschungsvorhaben und Prüfaufträge Methoden und Geräte getestet, verbessert und vor Ort unter Tage eingesetzt [1]. Die hier beschriebenen Verfahren lassen sich auch zu Untersuchungen im Wirtsgestein anwenden.

2. Untersuchungen am Versuchsbauwerk im ERAM Morsleben

Das untersuchte Abdichtbauwerk aus M2-Salzbeton befindet sich in Morsleben und wird als in-situ Großversuch zur Darstellung der Realisierbarkeit und Überprüfung der Bauwerkseigenschaften betrieben [1]. Hierbei wurde einen spezielle Messapparatur ("LAUS" – Large Aperture Ultrasonic System) mit einer Eindringtiefe von bis zu 10 m und eine dafür adaptierte Auswertesoftware (InterSAFT, K. Mayer, Universität Karlsruhe) eingesetzt. Dies kann mit Hilfe einer proprietären Methode der Phasenauswertung etwaige Reflektoren im Objekt nicht nur lokalisieren, sondern auch charakterisieren (schallhartschallweich: Luft-Metall). Aus an der Stirnseite gewonnenen Messdaten wurden 3D-Rekonstruktionen erstellt. Damit wurden in bis zu 7 m Entfernung hinter der Stirnfläche Reflektoren identifiziert, die zum Messzeitpunkt teilweise noch nicht bekannte auf Rissebenen schließen ließen. Diese wurden durch Bohrungen verifiziert.



Figure 1: Ultraschall-Rissindikatoren in einer Tiefe von -3,0 bis 3,2 m, projiziert auf die Ansicht des Abdichtbauwerks.

Durch eine in Kooperation mit der Bergakademie Freiberg (S. Buske und C. Büttner) adaptierte geophysikalische Abbildungsmethode ("RTM" reverse time migration) ließen sich die Rissbilder noch verbessern und auch eine in 8 m Tiefe befindliche Trennwand lokalisieren [3]. Die Eignung von Ultraschallmethoden zur Qualitätssicherung von Verschlussbauwerken konnte somit nachgewiesen werden [4]. Derzeit laufen weitere Messungen mit eine Bohrlochsonde.

3. Untersuchungen an Spritzbeton für Streckenverschlüsse

Zur Unterstützung des BMWi-finanzierten Projekts "MgO Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW Endlager im Steinsalz (MgO-S³)" werden Ultraschall-Messungen an Sorel-Spritzbeton-Probekörpern unter Tage in der Grube Teutschenthal mit dem A 1040 MIRA Messsystem der Firma Acoustic Control Systems (ACS) durchgeführt. Das Ziel ist es, die Eignung und Genauigkeit des Geräts für den Zweck die Qualitätssicherung von Spritzbetonbauwerken zu testen bzw. verifizieren. In den aus den Messdaten erstellten Rekonstruktionen sind vereinzelte, aber starke Reflektoren erkennbar. Sequentielle Reflektionen, die auf regelmäßige Ablösungen zwischen den Spritzbeton-Schichten hindeuten, sind in den Rekonstruktionen nicht erkennbar. Die Ergebnisse werden derzeit verifiziert. Grundsätzlich zeigt sich, dass mit dem Messsystem für die Qualitätssicherung von Spritzbetonbauwerken gut gearbeitet werden kann.

4. Themenfeldprojekt SealWasteSafe

Das BAM-interne Themenfeldprojekt SealWasteSafe soll den Stand der Technik für den Bau und die Überwachung von sicheren Abdichtbauwerken für Endlager für radioaktive oder toxische Abfälle vorantreiben. I, Fokus ist ein neuartiger Salzbeton, der weder signifikante Rissbildung noch Schwinden aufweist. Dieser wird für den Einsatz in den Abdichtbauwerken optimiert. Die Zusammensetzung dieses Materials basiert wird auf alkali-aktivierten Materialien, die sich durch besonders geringe thermische Verformungen während der Aushärtungsreaktion auszeichnen. Zur Überwachung wird sowohl auf unterschiedliche Sensoren mit RFID-Technologie als auch verteilte faseroptischen Sensorik (FOS) und optische Techniken für die Messung von Dehnung, Temperatur und Feuchtigkeit zurückgegriffen. Wichtiger Bestandteil sind auch hier ultraschallbasiert Methoden zur Rissdetektion. Unter anderem wird einen neuartige Bohrlochsonde entwickelt, mit der z. B. Ablösungen zwischen Wirtsgestein und Salzbeton besser zu erkunden sind. Ein Einsatz im Wirtsgestein zur Detektion von Rissen und Ablösungen ist ebenfalls denkbar.



Figure 2: Neuartige Ultraschall-Bohrlochsonde mit Phased-Array-Technologie

References

- Effner, U., Mielentz, F., Niederleithinger, E., Friedrich, Ch., Mauke, R., Mayer, K., "Prüfung von Abdichtbauwerken für Endlager auf Risse – eine Herausforderung/ Testing repository engineered barrier systems for cracks - a challenge", Materialwissenschaft und Werkstofftechnik/ Materials Science and Engineering Technology, zur Veröffentlichung angenommen
- [2] Niederleithinger, E., Effner, U., Behrens, M., Smith, S., "In situ-Versuch Abdichtbauwerk im Steinsalz, LAUS-Messungen an der Stirnseite" – Ergebnisbericht an die BGE (2018).
- [3] Büttner, C., Niederleithinger, E., Buske S.: Ultrasonic Echo Localization Using Seismic Migration Techniques in Engineered Barriers for Nuclear Waste Storage. In preparation. (2021)

[4] Niederleithinger, E., Effner, U., Behrens, M., Smith, S., Büttner, C., Friedrich, C., Mauke, R., "Application of ultrasonic techniques for quality assurance of salt concrete engineered barriers: Shape, cracks and delamination". Modern 2020, 2nd International Conference about Monitoring in Geological Disposal of Radioactive Waste, Paris, France (2019).
Outcome from the Meuse/Haute-Marne Underground research Laboratory on the behaviour of Callovo-Oxfordian claystone to different excavation technics: from the rock to the structure

G. Armand, J. Zghondi, R. de La Vaissière, J. Cornet, J. Jaber Andra, Laboratoire de recherche souterrain de Meuse/Haute-Marne, Bure, France

Key words: -

Summary

Since more than two decades, the French National Radioactive Waste Management Agency (Andra) has been leading several research programs to improve the knowledge of the Callovo-Oxfordian claystone properties and its response to the excavation progress at the Meuse/Haute-Marne Underground Research Laboratory (URL). Different technics of drift excavation and support have been tested in different parallel drifts parallel and perpendicular to the major horizontal stress and compared in terms of extent of the excavation induced fractures network, of convergence rate of the rock mass and loading rate of the concrete support. The knowledge collected from the URL is useful to design and optimize the future French HLW and IL-LLW Deep Geological Repository, aka Cigéo. Cigéo basic design outlines different kinds of drifts (access drift (mains), IL-LLW disposal vaults, technical drifts...), excavated by traditional (TCM) or mechanised (TBM) methods but with an average diameter around 10 m. The presentation recalls the major outcomes from the Meuse/Haute-Marne URL in term of advantage/disadvantage of different construction technics, hydro-mechanical behaviour of the rock mass and damage around the gallery and stress/deformation evolution in the lining.

1. Context



Figure 1: Possible layout of the Cigéo project

Clay formations in their natural state exhibit very favorable conditions for repository of radioactive waste, as they generally have a very low hydraulic conductivity, small molecular diffusion and significant retention capacity for radionuclide. That is why since the 1990 the French national radioactive waste

management agency studies feasibility of a radioactive waste deep geological storage in the Callovo-Oxfordian claystone (in the East of Paris Basin).

At the end of 15-year period of research (as defined in 1991Act), and following evaluation of the results the French parliament opted, in the 2006 Act, the implementation of deep-level geological storage for long-term management of high-level and medium-level long-life waste, adding a requirement for reversibility for a period of at least 100 years for the repository. Andra initiated a project known as "centre industriel de stockage géologique" ('industrial geological storage centre', called Cigéo) before carrying out outline studies, a preliminary design study and finally a detailed design study to request a license application for construction, planned now in 2021.

Cigéo would comprise a variety of underground structures (Fig 1), each with specific functions. Basically, these includes: (a) structures linking the surface to the facility (ramps and shafts) for transfer of containers, personnel and materials, including the removal of excavated clay, and the ventilation intake and outlet, (b) access galleries running from the bottom of the link structures to the storage areas and (c) storage areas comprising access galleries and storage cells. These structures feature specific geometrical characteristics and construction and operation procedures. The structures may vary in diameter from some 0.7 m (high-level waste storage cells) to more than 10 m (access galleries and storage cells for medium-level long life waste). The high-level waste storage cells are blind, and include steel lining in order to allow containers to be emplaced and, if necessary, removed.

Most of the structures have concrete lining excavated by traditional (TCM) or mechanised (TBM) methods depending and exhibit specific features:

- Long-term safety of the repository (after sealing): the construction, operation and more generally changes in the structures over time must preserve the favourable characteristics of the Callovo-Oxfordian in terms of radionuclides confining properties; in particular, this involves minimising damage to the rock around the structures walls.
- In operational terms, during the working period: the lifetime of the structures will be long around 1 to 1.5 century, the operational duration of Cigéo; there will be limited scope for rejuvenation of some structures, particularly storage cells, throughout this period.

In order to address the needs and specific characteristics outlined above, right from construction of the underground laboratory in 2000, Andra implemented a programme (Delay et al, 2007, Armand et al, 2015) to study the thermo-hydro-mechanical behaviour of Callovo- Oxfordian claystone and concurrently, techniques for the excavation, support and lining of structures. In particular, the aim was to fully understand rock/structure interactions: this involves a good understanding of the rock and structural behaviour, as well as of the way in which the structure is implemented. In particular, this relates to the quality of the interface between the structure and the rock and how it is installed, as well as the excavation method and type of structure (sprayed concrete, pored concrete, concrete wedge,...)

2. Experiments at the Meuse/Haute-Marne underground research laboratory

One of the main purposes for geomechanical experimental programme at the Meuse/Haute-Marne underground research laboratory is to provide the data, with supporting evidence, required for the safety assessment of a repository: extension, features and hydraulic properties of excavation damaged zone. The excavation worksite in the host layer is a scientific experimentation in itself to characterize the impacts of digging, to understand the hydro mechanical behaviour of the claystone and to study the excavation induced damage. Furthermore, understanding the impact of support and excavation methods on the hydro-mechanical behavior of the drift at short and long term is necessary to optimize the design of the support for the Cigéo repository.

A huge program of experiments is planned to characterize the response of the rock to different shaft and drift construction methods. Numerous experiments and direct measurements were performed in the laboratory drifts starting in 2004 (drift at a depth of -445 m excavated from the main shaft) and in



Figure 2: Meuse/Haute-Marne URL drift network

2005 (drifts at a depth of -490 m excavated from an auxiliary shaft), and also during the excavation and construction of the main shaft between -445 m and -490 m. A set by step approach, started in 2006, is carrying on today based on comparison of HM behavior of parallel drifts excavated/supported by different construction methods. These various configurations give insight of the influence of construction method on the EDZ extend and evolution and on the loading of the support. No fractures of tectonic origin have been observed in any of the boreholes drilled from the surface (in the region around the URL) or galleries within the underground laboratory. All the fractures observed are the induced during excavation phase.

At the main level located at 490 m (Fig. 2), the orientation of the scientific drifts has been determined according to the orientation of in situ stress field. Pneumatic hammer technique was first used for excavation. Bolts, sliding arches and 10 cm-thick layer of shotcrete were set in place immediately following a two-meter maximum progression. Other techniques have been and will be used, like road header (drift GET, GCS, GCR, GER), stiff and flexible support. A tunneling machine has been also tested (GRD and GVA drift) in 2013 and 2016 to test segments emplacement technique with different gap filling materials. All the new experimental drifts are instrumented in order to measure the short and long term hydro mechanical behavior and the excavation induced fractures network. Mine-bytest is the best way to achieve reliable hydro-mechanical data around a drift to give insight in timedependent processes to develop understanding of hydro-mechanical behavior and conceptual models of the excavation fractures network. Such test has been implemented in various rocks in several countries. At the main level of the Meuse/Haute-Marne URL, locations of the experimental drifts have been chosen, when it was possible, in order to perform mine-by experiments. The major issue was to provide deformation and pore pressure measurements in near and far field of the new excavated drift before excavation works in order to record the HM impact of the digging. Pore pressure measurements have been instrumented at least two months before drift excavation, to let pore pressure builds up and stabilizes.

3. Main results

For over fifteen years, development of the network of galleries in the underground laboratory and excavation tests for storage cells have demonstrated the capabilities for building deep-level underground structures in the Callovo-Oxfordian clay layer and their good performance over time. Today, Andra has significant, coherent and detailed knowledge of the effects of various methods of excavation and support. The result depend of the lithological unit in the Callovo-Oxfordian claystone. Broadly speaking, the Callovo-Oxfordian "carbonate-silt" and "clayey" units exhibit different mechanical behaviours: the former's more rigid nature results in significantly less rock damage during excavation (with no connected fractured zones) and minimal long term behaviour over time. In the "clayey" unit, with a uniaxial strength about 21 MPa, a large excavation induced fractures network appears during excavation (Armand et al, 2014). Two different zones of excavation induced fracturing can be clearly distinguished. The first zone near the drift (called the connected fractured zone) consists of extension and shear fractures. The orientation of both types of fractures is very heterogeneous with high dip fractures. The second zone (called "discrete fractured zone"), farther from the drift consists of shear fractures only. Their orientation is more homogeneous with low dip fractures. The data showed that most of the excavation induced fractures (75%), mainly at the front, appear in mode II or III (shear fracture) and 25% are in mode I at the main level of the URL.

Excavation technique with road header or hydraulic hammer, do not change the extension of the induced fracture. The support method play a role on the extent of the excavation fractured zone. In drift GRD/GVA2 excavated with a rod header under a shield, the concrete segment is a stiff support compared to sliding arches or shotcrete with yieldable concrete wedges. But in "soft" support drift like GCS, GET, GER rock bolts and shotcrete, put at less than one meter of the front face, start to work very early while in GRD drift the concrete segments start to work when the backfill material fulfil all the gap at the roof at nearly at 2 diameter of the front. During the first steps of excavation, the rock wall, at the roof, is not supported which implies larger deformation in the rock and larger extend of the induced fractures network.

In terms of long-term safety the clayey nature of the Callovo-Oxfordian claystone in the "clayey" unit is evidenced by 'hydraulic healing' of the fractures. Self-sealing (de La Vaissière et al, 2015) has been demonstrated from sample to in situ scale relating in particular to the presence of smectites. This means that the damaged zone around the drift is capable of recovering water permeability levels close to that of intact argillite when it is saturated.

Orientation of the drift, regarding to the horizontal major stress, plays an important role on the measured convergence. Anisotropic convergences are observed in all drifts (Armand et al., 2013 Guayacán-Carrillo et al, 2016). However, this anisotropy is smaller for drift parallel to the major stress than the one observed in the drift perpendicular to the major horizontal stress, where the stress anisotropy is larger (ratio ≈ 1.3). Furthermore, the anisotropy of convergence develops in two opposite directions in drifts parallel and perpendicular to σ H. That's why, disposal cells (HLW, IL-LLW) in Cigéo are oriented along the major horizontal stress σ H. Close analysis of the mechanical behaviour of the damaged zone shows that in the short to medium term, this is governed mainly by the excavation induced fractures network where most of the deformation are recorded. The first and principal differentiating factor is the orientation of the structure compared to local horizontal stress.

At the URL, the average diameter of the drift is about 5 to 6 m (i.e. about half the diameter of the Cigéo drift). The question emerges as is: are the results obtained in the URL transferable to Cigéo openings size? The small size of the two shafts (6 m and 5 m diameter) at the URL makes it difficult to build large-diameter underground structures. Nevertheless, drifts of 7 m and about 9 m have been excavated in two steps: first, the drift heading part is excavated all the length of the drift and in the second stage the bench drift is excavated. The observations suggest that a good transposition of the hydro-mechanical response to excavation progress is obtained, from a drift of about 5 m of diameter to drifts of higher diameter (Guayacán-Carrillo et al 2019).

Generally speaking, as regards the behaviour of concrete structures oriented along major horizontal stress, the following important points should be noted:

- The stiffness of the support/lining has an influence on soil convergence;
- The type of support/lining and the distance from the cutting face at which it is installed have a significant effect on the load amplitude for the concrete structure and on the anisotropy of

this load (mechanical signature), whereas deformation in the rock is always anisotropic (with horizontal convergence values larger than vertical convergence values). Radial bending behaviour may therefore be observed ;

- Irrespective of the type of support or lining, the concrete structure takes on load as of installation; this is consistent with observed changes in convergence values. Some delay in the "start-up" of loading of concrete lining poured in place in GCR may however be noted, due to its shrinkage during setting ;
- Concrete structures have continued slowly, to take on load and deform during the observation time.

An alternative design in which a compressible material is positioned between the concrete liner intrados and the rock walls: in such a situation, the "creeping effect" of the rock is mitigated, for a time, by the compressible material (nearly a perfect elastoplastic material), hence reducing the stress level exerted inside the concrete liner. This situation enables to significantly reduce the liner thickness and provides potentially significant saving in the construction of the works concerned. The URL offers a positive feedback concerning the behaviour of compressible elements already used in drifts experiments: compressible wedges (hiDCon($\mathbf{\hat{n}}$)) embedded in shotcrete primary linings, and compressible grout (DeCoGrout / Compex) for segments lining backfill. The third portion of the GVA drift confirmed the technical feasibility of setting "Compressible Arch Segments (VMC($\mathbf{\hat{n}}$))" in a real excavation test with a TBM, and permits to gain a feedback in various operational situations (Zghondi et al, 2018). The monitoring and analysis of the structure/rock interference will be followed in time. The global data analysis, will permit to verify, compares and estimates the reduction of the loading applied by the host rock and to the damping capacity of the VMC segments.

References

- Armand G., Leveau F., Nussbaum C., de La Vaissiere R., Noiret A., Jaeggi D., Landrein P., Righini C., 2014, Geometry and Properties of the Excavation-Induced Fractures at the Meuse/Haute-Marne URL Drifts, Rock mechanic and Rock engineering, Volume 47, Issue 1, pp 21-41
- [2] Armand G., Noiret A., Zghondi J., Seyedi D.M., 2013, Short- and long-term behaviors of drifts in the Callovo-Oxfordian claystone at the Meuse/Haute-Marne Underground Research Laboratory, Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering 5, pp 221–230
- [3] Armand G., Plas F., Bosgiraud j-M, 2015, L'apport du laboratoire souterrain de l'Andra pour le choix et la mise au point des techniques de creusement des ouvrages souterrains du projet de stockage de déchet radioactif Cigéo, Tunnels et ouvrages souterrain, n°250, p251-268 (ISSN 0399-0834)
- [4] De La Vaissière R., Armand G., Talandier J., 2015, Gas and water flow in an excavation-induced fracture network around an underground drift: A case study for a radioactive waste repository in clay rock, Journal of Hydrology 521, pp141–156
- [5] Delay, J., Vinsot, A., Krieguer, J.-M., Rebours, H. & Armand, G. 2007. Making of the underground scientific experimental programme at the Meuse/Haute-Marne underground research laboratory, northeastern France. Physics and Chemistry of the Earth, 32 (1/7): 2–18
- [6] Guayacan-Carrillo L.-M., Sulem J., Seyedi D., Ghabezloo S., Noiret A., Armand G. 2016 Analysis of Long-Term Anisotropic Convergence in Drifts Excavated in Callovo-Oxfordian Claystone, Rock Mech Rock Eng (2016), DOI 10.1007/s00603-015-0737-7, 49:97-114
- [7] Guayacán-Carrillo L.M., Armand G., Conil N., de la Vaissière R., Djizanne H., 2019. Impact of size excavation on time-dependent behavior of drifts excavated at the Meuse/Haute-Marne URL, Proc. 14th ISRM 2019 Congress. Iguaçu, Brasil, September 2019
- [8] Zghondi J., Armand G., Bosgiraud j-M, Simon J., Qualification, construction and analysis of a precasted compressible Arch Segments drift test in the Andra Meuse/Haute-Marne Underground Research Laboratory (URL), World Tunnel Congress 2018

Zusammenstellung von Erkundungszielen und -methoden für die übertägige Erkundung bei der Standortauswahl

T. Kneuker, T. Beilecke, L. Pollok, N. Schubarth-Engelschall, R. Semroch

Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover

 $Key\ words:$ Datenbank, Erkundungsmethoden, Erkundungsprogramm, Erkundungsziele, Standortauswahl

Mit dem Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standorts für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (StandAG) soll im Rahmen eines deutschlandweiten Auswahlverfahrens bis 2031 ein Standort für die sichere Endlagerung hochradioaktiver Abfälle gefunden werden. Die Vorhabenträgerin dieses Verfahrens, die Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE), hat zum Abschluss des Schritts 1 der Phase I am 28. September 2020 den Zwischenbericht Teilgebiete veröffentlicht, in dem nach Anwendung der Ausschlusskriterien, Mindestanforderungen und geowissenschaftlichen Abwägungskriterien 90 sogenannte Teilgebiete in Deutschland ausgewiesen wurden. In Phase II des Verfahrens sind Erkundungsmaßnahmen von über Tage in den identifizierten Standortregionen der Teilgebiete vorgesehen. Die übertägige Erkundung dient dazu, die standortbezogenen geowissenschaftlichen Daten zu ermitteln, die für die erneute Anwendung der geowissenschaftlichen Anforderungen und Kriterien gemäß StandAG und zur Durchführung der weiterentwickelten vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen erforderlich sind.

Im Auftrag der BGE stellt die Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) in zwei Arbeitspaketen geowissenschaftliche Erkundungsmethoden für die übertägige Standorterkundung zusammen: Im Projekt "GeoMePS" analysiert und bewertet die BGR geowissenschaftliche Methoden und Programme für die übertägige Standorterkundung gemäß § 16 des Standortauswahlgesetzes. In "ZuBe-MErk" werden entsprechend geophysikalische Methoden zur übertägigen Erkundung bewertet.

Als Grundlage für die Analyse wurden zunächst Erkundungsziele basierend auf den Anforderungen des StandAG, vorrangig aus den Ausschlusskriterien, Mindestanforderungen und geowissenschaftlichen Abwägungskriterien, abgeleitet [1]. Zudem wurden weitere Anforderungen des Standortauswahlgesetzes sowie die Erfahrungen der BGR in anderen Erkundungsprogrammen und Endlagerprojekten in die Erkundungszielebestimmung einbezogen. Anhand der Erkundungsziele wurden Erkundungsmethoden ausgewählt und als Katalog in eine Methoden-Datenbank namens GeM-DB (Geowissenschaftliche Methoden – Datenbank) integriert. Die Bewertung der Eignung der jeweiligen Methode erfolgt durch entsprechende Abfragen und Eintragungen von Methodenexpertinnen und -experten in der Datenbank. Mit Hilfe der Datenbank können die ausgewiesenen Untersuchungsmethoden im Hinblick auf ihre wirtsgesteinsspezifische Anwendbarkeit sowie zur Erreichung der entsprechenden Erkundungsziele zusammengestellt werden. Im Fokus der Datenbank stehen i. d. R. zerstörungsfreie bzw. minimalinvasive, übertägig und in Bohrungen einsetzbare geowissenschaftliche und geophysikalische Methoden. Sie dienen der lithologischen, strukturellen, mineralogischen, geochemischen, gesteinsmechanischen und hydrogeologischen Charakterisierung der potenziellen Wirts-/ Barrieregesteine Steinsalz, Tongestein und Kristallingestein, mit dem Ziel, die gesetzlichen Kriterien und Anforderungen an einen Endlagerstandort ortsspezifisch abzuprüfen.

Aufbauend auf dieser Methodenzusammenstellung und auf der ergänzenden Auswertung von nationalen und internationalen Fallstudien sollen in der weiteren Bearbeitung Empfehlungen für Erkundungsprogramme zur übertägigen Standorterkundung im Rahmen der Standortauswahl erarbeitet werden (Abb. 1). Die Erkundungsmethoden, ihre Darstellung und ihre Verknüpfung mit Erkundungszielen in der Datenbank werden in einem Bericht dokumentiert. In einem weiteren technischen Bericht werden



die Datenbankstruktur, ihre Inhalte sowie die Funktionen der GeM-DB erläutert.

Figure 1: Kernpunkte der Studien GeoMePS und ZuBeMErk bei der Zusammenstellung und Bewertung von Methoden für die übertägige Standorterkundung

References

[1] Kneuker, T., Bartels, A., Bebiolka, A., Beilecke, T., Frithjof, B., Beushausen, M., Frenzel, B., Jähne-Klingberg, F., Lang, J., Lippmann-Pipke, J., May, F., Mertineit, M., Noack, V., Pollok, L., Reinhold, K., Rummel, L., Schubarth-Engelschall, N., Schumacher, S., Stück, H. L. & Weber, J. R., Standortauswahl - Zusammenstellung und Bewertung von geowissenschaftlichen Methoden und Programmen für die übertägige Standorterkundung (GeoMePS): Zusammenstellung von Erkundungszielen für die übertägige Erkundung gemäß § 16 StandAG, 78 S. BGR, Hannover (2020).

Entwicklung der Datenbank GeM-DB zur Planung von übertägigen Erkundungsprogrammen

T. Beilecke, T. Kneuker, L. Pollok, N. Schubarth-Engelschall, R. Semroch

Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover

Key words: Datenbank, Erkundungsmethoden, Erkundungsprogramm, Erkundungsziele, Wirtsgesteine

Mit dem Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standorts für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (StandAG) soll im Rahmen eines deutschlandweiten Auswahlverfahrens bis 2031 ein Standort für die sichere Endlagerung hochradioaktiver Abfälle gefunden werden. Die Vorhabenträgerin dieses Verfahrens, die Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE), hat zum Abschluss des Schritts 1 der Phase I am 28. September 2020 den Zwischenbericht Teilgebiete veröffentlicht, in dem nach Anwendung der Ausschlusskriterien, Mindestanforderungen und geowissenschaftlichen Abwägungskriterien 90 sogenannte Teilgebiete in Deutschland ausgewiesen wurden. In Phase II des Verfahrens sind Erkundungsmaßnahmen von über Tage in den identifizierten Standortregionen der Teilgebiete vorgesehen. Die übertägige Erkundung dient dazu, die standortbezogenen geowissenschaftlichen Daten zu ermitteln, die für die erneute Anwendung der geowissenschaftlichen Anforderungen und Kriterien gemäß StandAG und zur Durchführung der weiterentwickelten vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen erforderlich sind.

Im Auftrag BGE erstellt die Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) zur Unterstützung dieses Auswahlverfahrens die Datenbank GeM-DB (Geowissenschaftliche Methoden – Datenbank) zu geowissenschaftlichen Erkundungsmethoden für übertägige und bohrloch-gestützte Erkundungen sowie Erkundungsmaßnahmen aus der Luft. Die in der Datenbank aufgenommenen Erkundungsmethoden wurden anhand von Erkundungszielen identifiziert, die die BGR, basierend auf den Anforderungen des StandAG, in einem Zwischenbericht zu den Arbeitspaketen "GeoMePS" und "ZuBe-MErk" abgeleitet [1] und als Bestandteil der Datenbank aufbereitet hat.

Die Erkundungsziele wurden in die Datenbankstruktur integriert, um darin einen differenzierten Bezug von Zielen und Erkundungsmethoden zu ermöglichen. Derzeit sind über 175 Erkundungsziele in der Datenbank enthalten. Für die Verknüpfung der Ziele mit geowissenschaftlichen Erkundungsmethoden wurde zudem eine Auftrennung der Erkundungsziele nach Wirtsgesteinen vorgenommen, da die drei Wirtsgesteine Steinsalz, Tongestein und Kristallingestein im Auswahlprozess in Betracht kommen und Erkundungsmethoden aufgrund unterschiedlicher Wirtsgesteinseigenschaften entsprechend unterschiedlich gut für deren Erkundung geeignet sind. Zusätzlich enthält die GeM-DB bezüglich der Erkundungsziele mögliche Methodenkombinationen, um die Planung wirtsgesteinsspezifischer Erkundungsprogramme zu unterstützen.

Die Erkundungsmethoden werden innerhalb der Datenbank neben einer allgemeinen Einführung anhand von Attributen wie räumliche Auflösung, gemessener Materialparameter oder Eindringtiefe beschrieben, um vergleichende Datenbankabfragen zu ermöglichen. Ein wesentlicher Aspekt der Methodenintegration ist eine jeweils kurze Methodenbeschreibung unter Zuhilfenahme von Literaturzitaten und teilweise Abbildungen. Durch eine Zitateverwaltung ist es möglich, die Methodenbeschreibungen in der Datenbank dauerhaft aktuell zu halten, indem neue wissenschaftliche oder technische Entwicklungen in den jeweiligen Methoden anhand aktualisierter Zitate nachgepflegt werden können. Damit wird die Datenbankpflege vereinfacht und eine langfristige Nutzbarkeit der Datenbank ermöglicht.

Die Datenbank ermöglicht Abfragen nach unterschiedlichen Vorgaben. Inhalte können mit Hilfe von

Exportfunktionen in Berichtsform ausgegeben werden.

Technische Grundlage der Datenbank ist Microsoft SQL Server. Die browserbasierte Oberfläche wurde mit Hilfe einer PHP-Web-Programmierung (PHP 7.4) ohne Framework realisiert.

Die Datenbankstruktur, ihre Inhalte sowie die Funktionen der GeM-DB werden in einem technischen Bericht dokumentiert. In einem weiteren Bericht werden die Erkundungsmethoden, ihre Darstellung und Verknüpfung mit Erkundungszielen in der Datenbank erläutert.

References

[1] Kneuker, T., Bartels, A., Bebiolka, A., Beilecke, T., Frithjof, B., Beushausen, M., Frenzel, B., Jähne-Klingberg, F., Lang, J., Lippmann-Pipke, J., May, F., Mertineit, M., Noack, V., Pollok, L., Reinhold, K., Rummel, L., Schubarth-Engelschall, N., Schumacher, S., Stück, H. L. & Weber, J. R., Standortauswahl - Zusammenstellung und Bewertung von geowissenschaftlichen Methoden und Programmen für die übertägige Standorterkundung (GeoMePS): Zusammenstellung von Erkundungszielen für die übertägige Erkundung gemäß § 16 StandAG, 78 S. BGR, Hannover (2020).

Uber die quartären Vulkanfelder hinaus - Indikatoren für einen zukünftigen Vulkanismus in Deutschland

L. Rummel^a, A. Bartels^a, F. May^a

^aBundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR)

Key words: Vulkanismus, Indikatoren, Standortauswahl

1. Abstract

Vergangene und möglicherweise rezente magmatische Prozesse äußern sich in einer Vielzahl an Phänomenen unterschiedlicher Reichweite. Für ein sicheres Endlager hochradioaktiver Abfallstoffe sind Gebiete auszuschließen, in denen, gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 5 StandAG, quartärer Vulkanismus vorliegt oder zukünftig vulkanische Aktivität zu erwarten ist. Während die Regionen mit quartärem Vulkanismus gut erforscht und bekannt sind, gibt es für die Prognosemöglichkeiten eines zukünftigen Vulkanismus in Deutschland keine allgemein anerkannten Methoden. Es gibt jedoch verschiedene Indikatoren, die Informationen zu magmatischen Prozessen und deren Auswirkungen liefern könnten [1, 2].

Zur Auswertung werden ausgewählten Indikatoren quantifizierbare Parameter zugewiesen und deren laterale Ausdehnungen aufgezeigt. Dabei werden die Parameter deutschlandweit betrachtet, um eine transparente und regional gleichberechtigte Bewertung zukünftiger vulkanischer Aktivität möglichst zu gewährleisten. Offen ist jedoch, welche Kombinationen von Parametern und deren Schwellenwerte letztendlich ein Gebiet kennzeichnen, in dem eine vulkanische Aktivität in den kommenden 1 Millionen Jahren wahrscheinlich bzw. nicht auszuschließen ist, und wie sich Gebiete voneinander abgrenzen lassen. Erste Ergebnisse einzelner Parameter zeigen, dass sich Phänomene, die vermutlich mit magmatischen Prozessen in Verbindung stehen, weit über die bekannten Vulkanfelder mit quartären Eruptionszentren hinaus erstrecken können (Abb. 1). So sind z.B. seismische Niedriggeschwindigkeitsanomalien im Erdmantel oder Austritte Kohlendioxid-haltiger Gase an der Erdoberfläche (Mofetten/Säuerlinge) weit über die quartären Vulkanfelder der Eifel und des Egergrabens hinaus nachweisbar.

Ziel des BGR-Forschungprojektes « Magmatismus » ist es, die möglichen Indikatoren sowie ihre zugewiesenen Parameter, unter Einbeziehung der wissenschaftlichen Gemeinschaft, hinsichtlich ihrer Relevanz für die Prognosemöglichkeiten eines zukünftigen Vulkanismus zu bewerten und auf dieser Basis eine deutschlandweit anwendbare Methode für die Abschätzung zukünftig möglicher Vulkanausbrüche zu entwickeln. Hierdurch soll eine detaillierte und nachvollziehbare Grundlage für die Prognose der vulkanischen Aktivität geschaffen werden, die neben dem Parameter « Vorkommen quartärer Eruptionszentren » weitere Parameter, die Rückschlüsse auf tiefreichende magmatische Prozesse liefern, miteinbezieht.





Figure 1: Horizontalschnitte durch die absoluten Änderungen isotroper Scherwellengeschwindigkeit (ΔV_s) mit einer Isofläche bei $\Delta V_s = -0.2$ km/s (links) und Isolinien bei $\Delta V_s = -0.2$ bzw. -0.15 km/s (rechts). Werte sind gemittelt über den horizontalen Durchschnitt (Daten aus: https://cos.ethz.ch/research/CSEM.html, siehe auch [3]). Vulkanische Gesteine/Ablagerungen bearbeitet nach ©Geoviewer der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover, 2020.

References

- May, F. (2019): Möglichkeiten der Prognose zukünftiger vulkanischer Aktivität in Deutschland, Kurzbericht BGR Hannover, 87 S.
- [2] Bartels, A., Rummel, L., May, F. (2020): Dokumentation und Auswertung einer Expertenbefragung zur langfristigen Vorhersage vulkanischer Aktivität in Deutschland. Bericht BGR Hannover, 104 S.
- [3] Fichtner, A., & Villaseñor, A. (2015): Crust and upper mantle of the western Mediterranean-Constraints from full-waveform inversion. Earth and Planetary Science Letters, 428, 52-62.

Seismic tomography under anisotropic conditions at the scale of an Underground Rock Laboratory in Opalinus Clay (Mont Terri)

R. Esefelder^a, B. Wawerzinek^a, S. Lüth^a, R. Giese^a, C. M. Krawczyk^a

 $^{a} Helmholtz\text{-}Zentrum\ Potsdam,\ Deutsches\ GeoForschungsZentrum\ (GFZ)$

Key words: seismic tomography, anisotropy, Mont Terri

1. Introduction

For the seismic characterization of claystone formations around the Mont Terri Rock Laboratory, a subsurface acquisition system developed at the German Research Centre for Geosciences (GFZ) [1] was used, which was successfully applied in rock salt and crystalline [2, 3]. To test the applicability in claystone formations a pilot survey was carried out in January 2019, comprising several niches and galleries of the underground rock laboratory (URL) Mont Terri. We used rock anchors, which are inserted 2 m into the tunnel walls, equipped with 3-component geophones, which always have the same orientation and therefore are suitable for repeat measurements. Various sources were used for the pilot survey, but for this study only data recorded with the pneumatic impact source were analysed. The aim of this study is to investigate the anisotropic character of claystone formations and to evaluate the applicability of the acquisition system in a relative sparse geometrical setup for tomographic imaging.

2. Anisotropic characterization

Since several sources were tested during this experiment, only a few shot points were recorded. Therefore the azimuthal coverage for anisotropic characterization is missing data, but for a first impression an elliptical fit for the shaly and carbonate-rich sandy (crs) facies of the Opalinus Clay can be computed. With this the average seismic P- and S-wave velocity anisotropy AvP and AvS are calculated [4]:

$$(v_{max} - v_{min})/v_{mean} \tag{1}$$

The anisotropy of the Opalinus Clay around the URL is transversely isotropic parallel to the bedding and the average seismic velocity anisotropy for P-wave and S-wave are in good agreement with other publications [4, 5].

3. Tomographic imaging

For tomographic imaging we used simulr16 [6], which is based on the SIMUL-family [7]. Simulr16 has the feature to set each anisotropic parameter independently for each grid node, which allows us to compute isotropic velocity models.

Because of the sparse acquisition geometry we decided for a more realistic initial model. Therefore we used velocities from other publications and simulated the excavation damage zone (EDZ) with a gaussian kernel filter. To study the influence of the anisotropy, we computed a (anisotropic) velocity model without any adjustments by the anisotropic parameters as reference for the (isotropic) velocity model, which takes the anisotropy into account. In the tomographic results the layer boundary between shaly and carbonate-rich sandy facies can be reconstructed well and the EDZ along the tunnel walls is also apparent. Initial tomographic inversion results assuming isotropic conditions show a strong influence of anisotropy, since the P-wave velocities are dependent on the propagation direction of ray paths.

References

- Borm & Giese, Geophysical investigations: integrated seismic imaging system for geological prediction during tunnel construction, in Kolymbas (Ed.), Rational Tunnelling Summerschool, Innsbruck, Logos Verlag, 225-234, (2003).
- [2] Lüth et al., Seismic investigations of the Piora Basin using S-wave conversions at the tunnel face of the Piora adit (Gotthard Base Tunnel), International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 45, 86-93, (2008).
- [3] Richter et al., Seismic surveying to explore the transition zone around caverns in saltrocks, Geophysical Research Abstracts, 21, EGU2019-8257 (2019).
- [4] Schuster et al., High-resolution mini-seismic methods applied in the Mont Terri rock laboratory (Switzerland), Swiss Journal of Geosciences, 110, 213-231, (2017).
- [5] Popp & Salzer, Anisotropy of seismic and mechanical properties of Opalinus Clay during triaxial deformation in a multi-anvil apparatus, Physics and Chemistry of the Earth, 32, 879-888 (2007).
- [6] Bleibinhaus, F., Entwicklung einer simultanen refraktions-und reflexionsseismischen 3D-Laufzeittomographie mit Anwendung auf tiefenseismische TRANSALP-Weitwinkeldaten aus den Ostalpen. PhD thesis, Ludwig-Maximilians-Universität, (2003).
- [7] Thurber, C.H., Earthquake locations and three-dimensional crustal structure in the Coyote Lake area, central California. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 88(B10):8226-8236, (1983).

Performance test of seismic sources in clay

B. Wawerzinek^a, S. Lüth^a, R. Esefelder^a, R. Giese^a, C. M. Krawczyk^{a,b}

^aHelmholtz-Zentrum Potsdam, Deutsches GeoForschungsZentrum (GFZ) ^bTU Berlin

Key words: seismic exploration, seismic sources sep Mont Terri

1. Introduction

Since clay formations are heterogeneous and anisotropic, their seismic characterization at the meso scale is challenging. To tackle this problem, new experiments using different sources were undertaken in Opalinus clay. A modular seismic acquisition and interpretation system, developed at GFZ for seismic exploration in the underground [1], was applied so far successfully in crystalline and rock salt environments [2, 3]. To investigate the applicability of the underground acquisition system for characterization and monitoring in clay, we carried out a seismic survey in the Mont Terri Underground Rock Laboratory (URL) in January 2019, using a pneumatic impact and magnetostrictive vibroseis source in combination with 3-component geophones in 2 m long rock anchors. A source comparison aims to evaluate (1) the performance of the seismic sources in clay and (2) their suitability for clay characterization and imaging.

2. Performance of seismic sources in clay

The pilot experiment with impact and vibroseis sources demonstrates their successful application in clay and detects in general similar wavefield characteristics. Despite the high attenuation of the Opalinus Clay both sources generate signals with penetration depth up to at least 65 m, however S-waves generated by the vibroseis source are weaker with smaller penetration depth. The impact source excites clear signals with strong lower frequencies and high signal-to-noise ratios. In contrast the vibroseis source has more control on frequency generation and is able to excite higher frequencies than the impact source. Frequencies above 800 Hz are strongly attenuated for both source types, but more pronounced for the impact source.

The performance test provides helpful information on potential applications of seismic sources in argillaceous settings. In general, both sources are well suited for underground exploration. The impact source is preferred for applications at large offsets, whereas the vibroseis source is preferred for highresolution applications at near offsets.

3. Suitability for clay characterization and imaging

The acquired data of both sources were appropriate to perform travel time analyses. The resulting average P- and S-wave velocities are clearly dependent on azimuth. The fast axis is approximately parallel to the direction of bedding strike. The shaly facies is characterized by slower velocities than the carbonate-rich sandy and sandy facies. The seismic velocity anisotropy in the shaly facies is stronger than in the sandy facies. The anisotropy is also more pronounced for S-waves than P-waves. Our findings, derived from in situ transmission experiments of the undisturbed rock, are in good agreement with seismic velocities and anisotropy determined in situ [4] and in the laboratory [5, 6]. Furthermore, they contribute to improving the knowledge on S-wave propagation in the Opalinus clay.

The acquisition geometry of this pilot survey was not optimal for reflection imaging of the geological conditions around the URL. A 3D migration test of the impact and vibroseis source data showed as seismic reflectors rather construction elements of the URL than geological heterogeneities. However, later arriving shear wave reflections could be extracted from the data. A 3D migration shows that these reflections were generated at a distance of ≈ 50 m at the transition from the lower sandy facies to the

upper shaly facies. The pilot survey confirmed that both sources are well suited for transmission experiments and reflection imaging in Opalinus clay. In spite of sparse acquisition geometry, an anisotropic average characterization of the different facies types was feasible.

References

- Borm & Giese, Geophysical investigations: integrated seismic imaging system for geological prediction during tunnel construction, in Kolymbas (Ed.), Rational Tunnelling Summerschool, Innsbruck, Logos Verlag, 225-234, (2003).
- [2] Lüth et al., Seismic investigations of the Piora Basin using S-wave conversions at the tunnel face of the Piora adit (Gotthard Base Tunnel), International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 45, 86-93 (2008).
- [3] *Richter et al.*, Seismic surveying to explore the transition zone around caverns in saltrocks, Geophysical Research Abstracts, 21, EGU2019-8257 (2019).
- [4] Schuster et al., High-resolution mini-seismic methods applied in the Mont Terri rock laboratory (Switzerland), Swiss Journal of Geosciences, 110, 213-231 (2017).
- [5] Popp & Salzer, Anisotropy of seismic and mechanical properties of Opalinus Clay during triaxial deformation in a multi-anvil apparatus, Physics and Chemistry of the Earth, 32, 879-888 (2007).
- [6] Siegesmund et al., Seismic and mechanical properties of Opalinus Clay: comparison between sandy and shaly facies from Mont Terri (Switzerland), Environmental Earth Sciences, 71, 3737-3749 (2014).

Faseroptische Strahlungssensoren für kerntechnische Anwendungen

A. Wosniok^a, K. Krebber^a

^aBAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung

Key words: Faseroptischer Strahlungssensor, ortsauflösende Fasersensorik, strahlungsinduzierte optische Dämpfung, Gammastrahlung, Rayleigh-Streuung, Brillouin-Streuung

1. Einleitung

Der Anstieg der Vielfalt nuklearer Anwendungen weit über die Bereiche der kerntechnischen Stromerzeugung erhöht die Relevanz der Entwicklung und Anwendung neuer Technologien zur Strahlungsüberwachung. Auch die offenen Sicherheitsfragen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle einschließlich Zwischen- und Endlagerungsproblematik verstärkt die Nachfrage nach effizienten Monitoringsystemen zum Schutz von Mensch und Umwelt vor ionisierender Strahlung. Aufgrund ihrer messtechnisch vorteilhaften Materialeigenschaften stellen die faseroptischen Strahlungssensoren eine vielversprechende Alternative zu traditionellen Dosimetern dar. Bedingt durch ihre kleinen Abmessungen, elektromagnetische Unempfindlichkeit und ihr geringes Gewicht können faseroptische Sensoren in einer harschen Umgebung an schwer zugänglichen Stellen eingesetzt werden. Darüber hinaus bietet diese Art der Sensoren die Möglichkeit der ortsverteilten Messung entlang der gesamten Sensorfaser. Somit kann durch eine einzelne optische Faser eine Vielzahl an punktuell messenden Sensoren ersetzt werden. Dieser Beitrag beschreibt die in der BAM vorangetriebenen Entwicklungen unterschiedlicher Sensorprinzipien, -lösungen und -verfahren zur Detektion ionisierender Strahlung.

2. Faseroptische Sensoren zur Strahlungsmessung

Die Entwicklung von Strahlungsensoren auf Basis optischer Fasern findet ihre Anfänge in den 70ern. Das erste Dosimeter basierte auf dem strahlungsinduzierten Anstieg der optischen Dämpfung (engl.: radiationinduced attenuation – RIA) [1]. Die strahlungsbedingte Zunahme der ortsverteilten RIA-Werte im Faserkern erwies sich als die bedeutendste Eigenschaft zur Realisierung der faseroptischen Dosimetrie mittels beider Faserarten: Glasfasern (engl.: silica optical fibers – SOF) und optischer Polymerfasern (engl.: polymer optical fibers – POF). Die Effektstärke variiert dabei deutlich je nach der Zusammensetzung des Fasermaterials, Faserherstellung sowie Strahlendosen. Bei den etablierten herkömmlichen SOF lassen sich Phosphor- [2, 3] Aluminium- [4] und Erbium-dotierte [5, 6] Fasern als besonders strahlungssensitiv einstufen. Eine erhöhte Strahlungssensitivität wird auch durch eine hohe Germanium-Dotierung im Faserkern [7] erreicht. Wie von uns in [5] berichtet, kann mittels einer optischen Frequenzbereichsreflektometrie eine hochaufgelöste Strahlungsmessung bei niedrigen Strahlendosen bis zu 5 kGy realisiert werden. Darüber hinaus wird in [5] gezeigt, dass der strahlungsinduzierte RIA-Anstieg nicht nur wie in der Kramers-Kronig-Dispersionsrelation [8] vorgegeben mit der Erhöhung des Brechungsindex n, sondern auch der Dichte ρ des Faserkernmaterials verbunden ist. Die strahlungsinduzierte Anderung von n und ρ kann messtechnisch zur ortsaufgelösten Strahlungsdetektion auf Basis der nichtlinearen Brillouin-Streuung im Bereich hoher Strahlendosen von mehreren MGy [7, 9, 10] genutzt werden. Ferner erfolgt hier die Strahlungsdetektion über die Ermittlung der sogenannten ortsverteilten Brillouin-Frequenzverschiebung f_b [11], deren Werte proportional zum Produkt $n\rho^{-0.5}$ sind. Die f_b -Messwerte der ursprünglich mit hohen Strahlendosen bestrahlten Sensorfasern weisen auch nach Abschluss der Bestrahlung kein nachweisbares Ausheilungsverhalten [7] auf und bleiben somit zeitstabil.

Die Strahlungsmessung kann auch punktuell realisiert werden [12, 13]. Es handelt sich hier um wellenlängenselektive Interferenzfilter, die in die optischen Fasern in Form von periodischen Modifikationen des Brechungsindex im Faserkern eingeschrieben werden. Die ionisierende Strahlung induziert dabei im Faserkern eine Änderung des effektiven Brechungsindex, die in einer Verschiebung der gemessenen Wellenlängen resultiert. Mit den punktuell messenden Sensoren lassen sich Strahlendosen bis zu 100 kGy erfassen. Bei der Messdatenauswertung muss allerdings noch das in [12] nachgewiesene Ausheilungsverhalten mitberücksichtigt werden.

Die zur Erforschung von POF-basierten Strahlungssensoren in der BAM an perfluorierten optischen Polymerfasern (PF-POF) durchgeführten Untersuchungen [14, 15?] haben gezeigt, dass diese Faserart viel höhere Sensitivität aufweist als die herkömmliche POF auf Basis von Polymethylmethacrylat (PMMA). Die Sensitivität erweist sich ferner abhängig von der Strahlendosisleistung und der genutzten Wellenlänge mit den besten Werten im sichtbaren Wellenlängenbereich, in dem die Strahlungsdosis von einigen Gy messtechnisch aufgelöst werden kann. Die in [16] vorgestellten Untersuchungen haben darüber hinaus gezeigt, dass die Sensitivität und die Temperaturempfindlichkeit auch vom Herstellungsprozess der PF-POF beeinflusst wird. Eine räumlich verteile PF-POF-basierte Strahlungsmessung kann mittels des in der BAM entwickelten Verfahrens I-OFDR [17] (engl.: incoherent optical frequency domain reflectometry) realisiert werden. Das Verfahren mit dem Potenzial zur Echtzeitmessung bietet eine hohe Dynamik und Ortsauflösung im Bereich von typischerweise 20 cm.

3. Zusammenfassung

Faseroptische Strahlungssensoren ermöglichen ein räumlich verteiltes Online-Monitoring entlang der gesamten Sensorfaser. Verschiedene Messverfahren nutzen überwiegend zwei durch die ionisierende Strahlung in optischen Fasern induzierte Effekte, d. h. die Erhöhung der optischen Dämpfung und die damit verbundene Veränderung des Brechungsindex des Fasermaterials. Die Sensitivität der Strahlungssensoren lässt sich je nach Anwendung durch die Wahl der Dotierstoffe im Glasfaserkern sowie der Art des Polymermaterials des POF-Sensors beeinflussen. Ferner ist die Sensitivität auch durch den Betrieb bei geeigneten Wellenlängen einstellbar. Bei dem sensorischen Einsatz von faseroptischen Sensoren muss auch die vorhandene Ausheilung des Sensors sowie die Abhängigkeit der erfassten Messsignale von der Temperatur und der Dosisleistung berücksichtigt werden.

References

- Evans B. D., Sigel G. H., Langworthy J. B., Faraday B. J., The fiber optic dosimeter on the navigational technology satellite 2. IEEE Transactions on Nuclear Science, 25(6), 1619-1624 (1978).
- [2] Paul M. C., Bohra D., Dhar A., Sen R., Bhatnagar P. K., Dasgupta K., Radiation response behavior of high phosphorous doped step-index multimode optical fibers under low dose gamma irradiation, Journal of non-crystalline solids, 355(28-30), 1496-1507 (2009).
- [3] Girard S., Ouerdane Y., Marcandella C., Boukenter A., Quenard S., Authier N., Feasibility of radiation dosimetry with phosphorusdoped optical fibers in the ultraviolet and visible domain, Journal of non-crystalline solids, 357(8-9), 1871-1874 (2011).
- [4] Faustov A. V., Gusarov A., Wuilpart M., Fotiadi A. A., Liokumovich L. B., Zolotovskiy I. O., Thomashuk A. L., de Schoutheete T., Megret P., Comparison of gamma-radiation induced attenuation in Al-doped, P-doped and Ge-doped fibres for dosimetry, IEEE Transactions on Nuclear Science, 60(4), 2511-2517 (2013).
- [5] Wosniok A., Sporea D., Negut D., Krebber K., Gamma radiation influence on silica optical fibers measured by optical backscatter reflectometry and Brillouin sensing technique, Proc. Of SPIE, 9916, 99162J-1 - 99162J-4 (2016).
- [6] Perez-Herrera R. A., Stancalie A., Cabezudo P., Sporea D., Negut D., Lopez-Amo M., Gamma Radiation-Induced Effects over an Optical Fiber Laser: Towards New Sensing Applications, Sensors, 20(11), 3017 (2020).
- [7] Phéron X., Girard S., Boukenter A., Brichard B., Delepine-Lesoille S., Bertrand J., Ouerdane Y., High γ-ray dose radiation effects on the performances of Brillouin scattering based optical fiber sensors, Optics Express, 20(24), 26978-26985 (2012).
- [8] Othonos A., Kalli K., Fiber Bragg Gratings: Fundamentals and Applications in Telecommunications and Sensing, 433, Artech House, Boston (1999).
- [9] Alasia D., Fernandez A. F., Brichard B., Abrardi L., Thévenaz L., Study of the radiation effects on the properties of Brillouin scattering in standard Ge-doped optical fibres, Proc. of SPIE, 5855, 180-183 (2005).
- [10] Piccolo A., Delepine-Lesoille S., Landolt M., Osmond M., Poirier S., Planes I., Girard S., Ouerdane Y., Boukenter A., Leduc D., Lecieux Y., Combined radiation and temperature effects on Brillouin scattering based sensing with Ge-doped optical fibers, Optical Society of America, WF 44 (2018).
- [11] Agrawal G. P, Nonlinear Fiber Optics, 342, Academic Press, San Diego (1989).
- [12] Schukar M., Krebber, K., Scheer M., Strahlungsüberwachung mit Faser-Bragg-Gitter-Sensoren am Elektronenspeicherring BESSYII, Technisches Messen, 75(4), 245-250 (2008).
- [13] Witt J., Schukar M., Breithaupt M., Müller B., Krebber K., MPOF LPGs as radiation sensors, Proc. of POF 2011, 1-3 (2011).
- [14] Stajanca P., Sporea D., Mihai L., Negut D., Schukar M., Krebber K., Gamma radiation induced effects in perfluorinated polymer optical fibers for sensing applications, POF Simulation beyond Data Transmission; Summary of the 3rd International POF Modelling Workshop,95-103 (2015).

- [15] Stajanca P., Mihai L., Sporea D., Negut D., Krebber K., Perfluorinated polymer optical fiber for gamma radiation monitoring, Proc. of SPIE, 9916, 99160H-1 – 99160H-4 (2016).
- [16] Stajanca P., Krebber K., Radiation-induced attenuation of perfluorinated polymer optical fibers for radiation monitoring, Sensors, 17(9), 1959 (2017).
- [17] Liehr S., Nöther N., Krebber K., Incoherent optical frequency domain reflectometry and distributed strain detection in polymer optical fibers, Measurement Science and Technology, 21(1), 017001 (2009).

«Model-supported assessment of the efficiency of the geological barriers as a contribution to the site selection process for deep geological repository in Switzerland»

P. Marschall^a, O. Leupin^a, A. Papafotiou^b, C. Li^b, P. Smith^c

^a Nagra, Nationale Genossenschaft für die Lagerung Radioaktiver Abfälle, Wettingen, Switzerland ^b Intera Swiss Branch, Wettingen, Switzerland ^c Safety Assessment Management, Switzerland

Key words: deep geological disposal, site selection, performance assessment, barrier efficiency, barrier integrity, performance indicators

1 Introduction

In Switzerland, the Nuclear Energy Law requires the disposal of all types of radioactive waste in deep geological repositories. The Swiss Radioactive Waste Management Program foresees two types of repositories: a high-level waste repository (HLW repository) for spent fuel, vitrified high-level waste and long-lived intermediate-level waste, and a repository for low- and intermediate-level waste (L/ILW repository). The procedure for selecting the repositories (SGT) and consists of three stages [1]. In the current of the Sectoral Plan for Deep Geological Repositories (SGT) and consists of three stages [1]. In the current Stage 3, the three candidate siting regions Jura Ost (JO), Nördlich Lägern (NL) and Zürich Nordost (ZNO) in Northern Switzerland are examined in detail and, where necessary, supplementary geological investigations are being performed. The broadened site-specific database forms the basis to select, for each of the repositories, the site for which the general license application will be prepared. Following the specifications in the Sectoral Plan, a criteria-based indicator approach will be adopted to ensure a traceable implementation of the site-selection process with the latest version of the site-specific database.

This note presents a criteria-based indicator workflow for site selection, aimed at comparing favourable and less favourable aspects of the potential siting areas that have been identified in the earlier stages of SGT. The performance of the geological barriers in the three candidate siting regions in Northern Switzerland can be assessed with a portfolio of numerical models, addressing different aspects of long-term safety and engineering suitability of the site-specific repository projects in a quantitative manner. Emphasis of this paper is on three criteria associated with the reliability of the geological findings from surface investigation in terms of the ease of characterisation and exploration and in terms of the long-term predictability of geological conditions.

2 The criteria-based indicator approach in brief

In the conceptual part of the Sectoral Plan, the regulator has defined the goals, procedures and criteria to be applied in selecting sites for deep geological repositories for all categories of radioactive waste in Switzerland. The focus of the stepwise site-selection process is on safety-based criteria and indicators, with land use and socio-economic aspects playing a secondary role. Four criteria groups and a total of 13 criteria to be assessed from the viewpoint of safety and technical feasibility are defined (Tab. 1).

Criteria Group 1 considers the performance of the host rock based on its characteristics at the start of assessment period, i.e. at the time of repository closure, assuming that these are unperturbed by the presence of the repository. Criteria Group 2, on the other hand, is related to the alternative evolutionary scenarios for the host rock that may arise during the assessment period due to the effects of geological long-term evolution, repository-induced effects and human actions. Practical limitations in the degree to which it is possible to characterise and explore the geological barrier and to predict its long-term evolution based on site investigations give rise to uncertainty, the impact of which is addressed in the context of Criteria Group 3. Finally, Criteria Group 4 concentrates on the suitability of the host rock and overlying strata at each site to host the repository and its access structures from an engineering perspective.

Criteria group	Criteria
1. Properties of the host rock and the effective containment zone	1.1 Spatial extent1.2 Hydraulic barrier effect1.3 Geochemical conditions1.4 Release pathways
2. Long-term stability	2.1 Stability of the site and rock properties2.2 Erosion2.3 Repository-induced influences2.4 Conflicts of use
3. Reliability of geological findings	3.1 Ease of characterisation of the rock3.2 Explorability of spatial conditions3.3 Predictability of long-term changes
4. Engineering suitability	4.1 Rock mechanical properties and conditions 4.2 Underground access and drainage

Table 1: Criteria for site selection to be assessed from the viewpoint of safety and technical feasibility according to [1].

The Sectoral Plan also specifies, for each of the criteria, the various "aspect(s) to be evaluated" and their corresponding relevance for safety. In Criteria Group 3 the "aspects to be evaluated" are concerning the inherent uncertainties associated with the geological conditions in the candidate siting regions which cannot be reduced by further site investigations from surface. The safety related comparison of the sites requires different categories of uncertainties to be addressed, namely parametric uncertainties, conceptual uncertainties and scenario uncertainties (i.e. geological long-term evolution of the siting regions). From a long-term safety perspective, focus of the site comparison is on:

- the performance of the geological barrier in limiting the migration of radionuclides, and
- the mechanical integrity of the geological barrier.

Quantitative comparison of the siting areas with respect to the criteria of Criteria Group 3 requires just two performance indicators:

- the mass fractions of a dissolved species ("tracer mass flux") released from the repository to the upper / lower confining units above / below the host rock, representing a measure for the radionuclide transport through the host rock, and
- the geomechanical stress state of the host rock in terms of deviatoric stress and mean effective stress, representing a measure for the mechanical integrity of the barriers ("slip tendency").

The two performance indicators can be derived for a given repository configuration by numerical modelling. The modelling workflow foresees the development of site-specific assessment models and site-specific assessment scenarios to compare the performance of the geological barriers in the three the siting regions.

3 Site-specific assessment models and assessment scenarios

Example configurations were developed in preparation of SGT Stage 3 ("Site selection and licence application"), representing the HLW- and L/ILW-repository in the three siting regions JO, NL and ZNO. Figure 1 shows a 3-D view of the implemented HLW repository structures at a hypothetical location in the south-eastern part of the siting region ZNO with a footprint area of 4 x 4 km². The model includes the Mesozoic layer stack ranging from Malm to Muschelkalk and exhibits the major tectonic structures, derived from the interpretation of the 3-D seismic survey in the siting area. Similar repository models (HLW and L/ILW) were established for all siting areas; they are forming the basis for the development of a traceable workflow for model-supported comparison of the site-specific repository projects.



Figure 1: Example configuration representing the HLW-repository in the geological setting of the siting region ZNO. The Mesozoic layer stack from Malm to Muschelkalk and the tectonic features were derived from the interpretation of a 3-D seismic survey in the siting region.

In this note, the hypothetical HLW repository configuration in the eastern part of the siting area ZNO is selected to demonstrate in principle the assessment workflow for Criteria Group 3. The assessment model described here is, with some minor adaptions, applicable to both performance indicators, specified in section 2 ("tracer mass flux", "geomechanical stress state"). Setting up the assessment model consists of the following steps (Figure 2):

(1) Placement of the repository structures in the center of the host rock in an area of the layer model with low density of faults (Fig. 2, left side). The 3-D model with a 4 x 4 km² footprint and a vertical extension from the Muschelkalk aquifer to ground surface is called the "3-D repository model". The repository model can be converted from a layer model into a volume model for the purpose of flow- and transport simulations. Flow simulations with the 3-D repository model are time consuming; they are mainly used for benchmarking the 2-D assessment models.

(2) A vertical cross-section is placed in the 3-D repository model, oriented perpendicular to the HLW tunnels and intersecting them at half-length (red plane in the block model in Figure 2). This vertical cross-section through the layer stack forms the geometric structure of the 2-D assessment models for flow- and transport simulations. The layers are discretised using a regular mesh and the flow and transport properties are assigned to each element of the mesh (hydraulic conductivity, porosity, effective diffusion coefficient. This allows to implement both homogeneous and heterogeneous property distributions. Flow- and transport simulations with the 2-D models are acceptably fast and allow to perform probabilistic assessments.

(3) On top of the layer sequences, discrete fault zones can be implemented in the 2-D assessment models. Thus, steeply dipping fault zones that have been mapped at Top Muschelkalk with the 3-D seismic interpretation can be extrapolated through the entire model, intersecting the host rock and the repository structure, respectively (Figure 2, right side). Property assignments in terms of porosity, hydraulic conductivity and diffusion coefficient can be derived from laboratory tests on remolded and recompacted material.

(4) Hydraulic and transport boundary conditions must be specified for the assessment models. In case of thermo-hydraulic simulations (repository induced effects: gas release, thermal effects) additional boundary conditions are required. The lateral boundary conditions are specified as no-flow conditions. The upper and lower local / regional aquifer systems are represented by prescribed pressure / zero concentration boundary conditions.

(5) Depending on the aspect to be evaluated and the corresponding performance indicator, a source term is located at the center of each HLW tunnel. This can be a thermal or a gas source term for the assessment of uncertainties associated thermally/gas induced failure of the host rock. In this note, the source term represents the release of a hypothetical, dissolved, non-sorbing, stable element from the waste forms, needed for the assessment of irreducible uncertainties associated with the performance of the host rock as a

transport barrier. For simplicity, the simulations of diffusive/advective transport of the dissolved tracer are performed with a unit release rate (unit step function).



Figure 2: Derivation of the 2-D assessment model from the 3-D repository model. Heterogeneous property distributions (top-down: clay content, porosity, hydraulic conductivity, effective diffusion coefficient) are assigned to the host rock in the 2-D assessment model.

4 Applications

This section presents applications of the indicator approach in the context of Criteria Group 3. The assessment model used for the simulation of tracer release from the repository structures into the upper and lower confining units refers to a vertical 2-D cross-section throughout the middle of the HLW repository configuration in the ZNO site as described in Section 3 (red plane in Figure 2). The addressed scenarios and conceptualisations are detailed in the following sections.

Criterion 3.1: The spatial variability of facies properties (clay content) and the associated safety-relevant flow and transport properties of the host rock (porosity, hydraulic conductivity, effective diffusion coefficient) are the assessment aspects addressed in Criterion 3.1 ("Ease of characterization"). Scenario uncertainty and conceptual uncertainty are tackled by defining complementary scenarios with heterogeneous distributions of transport properties in the host rock formation. It is assumed that the clay content (cc) distribution follows a gaussian variogram (Figure 3, left side). In vertical direction the model variogram is conditioned with logging data from the deep investigation borehole near the village Benken. The horizontal correlation length is assumed to range between 0 and 2000 m. Well-established empirical correlations are applied for the clay content - porosity (cc-n) relationship, for the porosity – permeability relationship (Kozeny-Carman) and for the relationship between porosity and effective diffusion coefficient (extended Archie's law). A vertical porewater flow (upflow) is assumed, driven by a hydraulic head difference of 300 m between lower and the upper aquifer systems (Lias-Keuper / Malm).

Three sets of probabilistic Monte Carlo (MC) simulations are discussed here. Each set of MC simulations consists of 300 runs. The choice of the input parameters is performed by MC hypercube sampling. The simulations explore the conceptual and parametric uncertainties associated with the horizontal correlation length of clay content in the host rock.

Advective / diffusive tracer transport from the HLW tunnels into the upper confining units is analysed by calculating the cumulative (total) tracer mass flux across the upper boundary of the host rock (OPA). For each set of MC simulations the transients of the normalised total tracer flux are displayed in the diagrams in Figure 3. The differences in the total tracer fluxes are surprisingly low, despite of the significant differences in the variograms of clay content. This can be explained by the fact, that tracer transport is diffusion dominated in all MC simulations; in other words, the head difference of 300 m between the regional aquifer systems does not give rise to a transition from diffusion dominated transport to an advective regime.



Figure 3: Realisations of clay content distributions in the host rock (left side) and results of probabilistic simulations of tracer release from the HLW tunnels into the upper confining unit (right side): Gaussian model variogram of clay content without correlation length (top), Gaussian model variogram of clay content with λ_h = 100 m (middle), Gaussian model variogram of clay content with λ_h = 2000 m (lower).

Criterion 3.2 ("Explorability of spatial conditions"): The assessment aspect of concern is the irreducible uncertainty associated with the site-specific extent of tectonic structures and the safety-relevant flow and transport properties thereof. Scenario uncertainty, conceptual and parametric uncertainty are tackled by defining complementary conceptualisations of the fault systems. For the hypothetic HLW repository configuration in the south-eastern part of ZNO (Figure 2) it is assumed that two steeply dipping fault zones that have been mapped at Top Muschelkalk can be extrapolated through the entire model, intersecting the host rock and the repository structure, respectively (Figure 4). The impact of the fault systems on the overall barrier function of the host rock is assessed in a parametric study. For this, the heterogeneous distributions of transport properties in the host rock formation remain the same as in Figure 3 (middle). High porosity (n = 40%) and high hydraulic conductivity (K = 1E-10 m/s) is assigned to the faults. The thickness of the faults is 4 m. A vertical porewater flow (upflow) is assumed, driven by a hydraulic head difference of 300 m between lower and the upper aquifer systems (Lias-Keuper / Malm).

A single set of probabilistic MC simulations (300 runs) is discussed here. The simulations explore the impact of the permeable faults on the overall barrier efficiency of the host rock.

The transients of the normalised total tracer fluxes are displayed in the diagram in Figure 3 together with the ensemble mean (red line), which was derived by superposition of all MC runs. The comparison of the normalized fluxes with the scenarios without faults (Figure 3) indicates a significant difference in the early arrivals. Advection along the two faults gives rise to an early tracer breakthrough at low concentration. Thus, the 10^{-6} -level of normalized tracer flux is reached in the simulations with faults after 20'000 - 30'000 years, whereas the corresponding range of breakthrough is observed between 50'000 and 60'000 years for the probabilistic simulations without faults. On the other hand, it should be noted that the early arrival of the conservative tracer at the 10^{-6} -level is not safety relevant.



Figure 4: Conceptualisation of the host rock with stochastic K- and D_{eff}-distributions and 2 steeply dipping faults (left side) and results of probabilistic simulations of tracer release from the HLW tunnels into the upper confining unit (right side).

Criterion 3.3 ("Predictability of long-term changes"): A wide spectrum of scenarios associated with the geological long-term of the siting regions is addressed with this criterion. An aspect to be evaluated are the irreducible uncertainties associated with the geological long-term evolution on radionuclide release at each of the three sites. In this note emphasis is on the impact of erosion and uplift on the barrier function of the host rock.

Uplift and/or erosion may impair the barrier performance of the host rock by lowering of effective normal stress on (tight) faults, entailed by an enhanced slip tendency and - under unfavourable circumstances - giving rise to fault activation (Figure 5). For a given site, the geomechanical conditions for fault activation can be inferred easily, when the present stress conditions at repository level and the residual strength of the host rock are known.



Figure 5: Principal sketch illustrating the potential for fault activation by uplift and erosion.

An uplift / erosion scenario was specified for the hypothetic HLW repository in ZNO by activating the two faults in Figure 4, when the repository level is "heaved" by 200 m. The faults are initially tight; high porosity (n = 40%) and high hydraulic conductivity (K = 1E-10 m/s) is assigned to the faults when the overburden has been reduced by 200 m. As in the previous scenarios, a vertical porewater flow (upflow) is assumed, driven by a hydraulic head difference of 300 m between lower and the upper aquifer systems (Lias-Keuper / Malm). The loss of overburden during the next 10 mio years is formulated in terms of a hypothetical parametric relationship (mean \pm 1 standard deviation; Figure 6 left).

A single set of probabilistic MC simulations (300 runs) with the fault activation scenario is discussed here. The simulations explore the impact of fault activation in the context of long-term evolution scenarios on the overall barrier efficiency of the host rock. 300 simulations of loss of overburden versus time (Figure 6 left) are forming the input for the probabilistic assessment. For this, the time needed to uplift the repository level by 200 m is determined for each of the 300 realisations. Multiple simulations of tracer transport are performed, starting with a low permeability intact host rock scenario (Figure 3) and switching to a fault scenario (Figure 4) as soon as the repository level has been uplifted by 200 m.



Figure 6: Fault activation scenario: hypothetical parametric relationship used to produce 300 realisations representing loss of overburden versus time (left side) and results of probabilistic simulations of tracer release from the HLW tunnels into the upper confining unit (right side).

The simulations contributing to the fault activation scenario are shown in Figure 6 (right). In the early times the tracer fluxes compare well with the results of scenario an intact host rock (Figure 3). The on-set of fault activation is observed after around 200'000 years, representing scenarios with the highest uplift rates. After fault activation, the tracer fluxes are characterized by a sudden increase, followed by a gentle drop and a smooth approach towards the tracer flux curve of the intact rock. In general, the fault activation scenario seems to be slightly more favourable as compared to the scenario presented in Figure 4.

5 Conclusiding remarks

The Sectoral Plan for Deep Geological Repositories drawn up by the Swiss regulator foresees a criteriabased indicator approach to ensure a traceable implementation of the site-selection process in Switzerland. Following the requirements and guidelines of the regulator, Nagra is striving for a transparent and verifiable workflow for site selection, aimed at comparing favourable and less favourable aspects of the potential siting areas that have been identified in the earlier stages of SGT.

Model-supported assessments of the efficiency of the geological barriers are a key element of the proposed indicator approach. A detailed analysis of the Sectoral Plan with the 13 site selection criteria and the corresponding "aspects to be evaluated" forms the starting point in the workflow. The assessment aspects are addressed in terms of quantitative "performance indicators", which can be calculated by numerical modelling. The complex site-specific models are abstracted in a traceable manner towards simplified assessment models. This allows to bracket the propagation of uncertainties associated with the geometric abstraction and simplified representation of processes in the assessment models. Plausible assessment scenarios and conceptualisations are formulated to address conceptual and parametric uncertainties in the site-specific geodata bases as well as scenario uncertainties associated with the repository evolution. The proposed workflow foresees a set of QA/QC control points which allow the regulator to review the basic assumptions, the applied modelling tools and the implemented site-specific data bases.

This note presents not only a basic outline of the proposed indicator workflow but provides also selected applications addressing the reliability of the geological findings from surface investigation in terms of the ease of characterisation and exploration and in terms of the long-term predictability of geological conditions. The model-supported assessments are applied to a hypothetical HLW repository configuration in the siting region ZNO. For that, the release of a hypothetical, dissolved, non-sorbing, stable element from the waste forms ("tracer mass flux") towards the upper / lower confining units is simulated, presenting a performance indicator for the radionuclide transport through the host rock, which can be compared to the corresponding mass flux from a repository location in the other siting regions. This allows to evaluate in a quantitative manner the efficiency of the geological barrier for each of the site-specific repository projects.

The Role of Geological Models and Uncertainties in Safety Assessments

Merle Bjorge^a, Phillip Kreye^a, Elisa Heim^b, Florian Wellmann^{c,d}, Wolfram Rühaak^a

^aBundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE), Peine

^bInstitute for Applied Geophysics and Geothermal Energy, RWTH Aachen University

^cLehr- und Forschungsgebiet Computational Geoscience and Reservoir Engineering, RWTH Aachen University ^dAachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science, RWTH Aachen University

Key words: safety assessments, uncertainties, thermo-mechanical coupling

Safety assessments are a central part in nuclear waste management and include the analysis of thermo-mechanical (TM) coupled processes. TM behavior of the host rock is, amongst others, dependent on the prevalent geological geometries. This study aims to evaluate the impact of 3-D geological models and input data uncertainty on the TM behavior in claystone and the effect on the integrity of the rock.

To analyze the influence of geological geometries, a generic model of the region around the Mont Terri rock laboratory was created. First, a 3-D structural geological model was set up with GemPy [1]. Furthermore, uncertainties of the lithological contacts were quantified by means of stochastic simulations in GemPy, producing different model realizations. To quantify the uncertainties a location and orientation uncertainty was applied to the input data. The location uncertainty was defined by a normal distribution with a standard deviation of 7 m, whereas the orientation uncertainty was characterized by a Von Mises-Fisher distribution with a concentration parameter of 50.

A total of 89 cross-sections of different 3-D model realizations were transformed to a numerical model in Matlab. In this numerical model, 2-D TM coupled simulations were computed over a simulation time of 500 years using Matlab, which employ the Finite Element Method [2, 3]. To simulate a heat source of nuclear waste, a Dirichlet boundary condition of 100°C was set on the lower edge of the model while the remaining rock was initially in geothermal equilibrium. The results of these simulations show mean temperature variations of 90.9 °C to 92.7 °C after 500 years, maximum stress varying between 0.019 MPa and 0.16 MPa of elastic shear energy density and according mean cumulative displacements ranging from 30 cm to 38 cm. Peaks in stress were recorded at contacts between different lithologies and the simulated heat source. The presented results indicate that different model geometries and differences in rock parameters lead to noticeable variabilities of the TM behavior of claystone.

Finally, the results were compared to critical stresses of the deformation behavior of clay rock. This reveals that at high lateral confining stresses, as it is the case at repository conditions, the rock is not affected by the presented stress variabilities.

References

 de la Varga, M., Schaaf, A., Wellmann, F., GemPy 1.0: Open-source stochastic geological modelling and inversion, Geosci. Model Dev., 12, 1-32 (2019).

- [2] Alberty, J., Carstensen, C., Funken, S. A., Remarks around 50 lines of Matlab: short finite element implementation, Numer. Algorithms, 20, 117-137 (1999).
- [3] Alberty, J., Carstensen, C., Funken, S.A., Klose, R., Matlab implementation of the finite element method in elasticity. Computing, 69(3), 239-263 (2002)

UMAN – A EURAD Work Package dedicated to networking on uncertainty management

A. Strusińska-Correia^a, A. Göbel^a, F. Lemy^b, V. Detilleux^b, D.-A. Becker^c, D. Diaconu^d, J. Dewoghélaëre^e

^aBundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE mbH), Germany ^bBel V, Belgium ^cGesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) Braunschweig, Germany ^dTechnologies for Nuclear Energy State Owned Company (RATEN), Romania ^eMUTADIS, France

Key words: radioactive waste management programme, uncertainty management, safety, actors

1. Framework of the European Joint Programme EURAD

The European Joint Programme on Radioactive Waste Management (EURAD) has been initiated in June 2019 with the main purpose of deepening the collaboration among the European Member States on research and knowledge management activities towards the development of safe and publicly acceptable solutions for the radioactive waste management (RWM) [1]. Further, the EURAD activities support the implementation of national RWM programmes in compliance with the Council Directive [2]. Through the collaboration of Member States with different radioactive waste inventories, different implementation stages of their national RWM programme and different considered repository options, the knowledge, experience and technology transfer and sharing at the European level are pursued. Waste Management Organisations (WMOs), Technical Support Organisations (TSOs) and Research Entities (REs), representing the individual Member States, are engaged in the EURAD Joint Programme, which encompasses work packages (WP) dedicated to RD&D activities, Strategic Studies (SS) and Knowledge Management (KM).

2. Importance of uncertainties for RWM as motivation for the EURAD WP UMAN

Decisions associated with each phase of the RWM programme have to be made in the presence of both reducible and irreducible uncertainties. Uncertainties will inevitably remain at the end of the process, however it is necessary to demonstrate that they do not undermine the safety arguments. Clearly, uncertainty management, including uncertainty identification, characterisation, classification, analysis, treatment, assessment, reduction, avoidance and mitigation, is indispensable for a successful implementation of RWM programme, particularly in regards to the safety case of the waste disposal facility. The relevance of the uncertainties to RWM has been recognised in the EURAD Strategic Research Agenda [3] and Roadmap [4], in which they are outlined as a cross-cutting issue within the different themes and RWM programme phases. Associated RD&D activities aim at the improvement of the state of knowledge and techniques. It is necessary to comprehend the contribution of these activities to uncertainty reduction within the uncertainty management.

3. Objectives and structure of the EURAD WP UMAN

The Work Package "Uncertainty Management Multi-Actor Network" (UMAN) represents one of the Strategic Studies of the EURAD Joint Programme, aiming in the first instance at establishing a common understanding among the different involved actors, including Civil Society (CS), on the management of potentially safety-relevant uncertainties at all stages of RWM, considering in particular the relevance of RD&D activities. The attention is paid to uncertainties related to the EURAD RD&D WPs and to the subdomains of the EURAD Strategic Research Agenda [3] of a high/medium priority, for which a great

interest in exchanges among the actors was identified. In the first wave of the EURAD programme, uncertainties linked to site and geosphere, human aspects, spent nuclear fuel and waste inventory are considered. The WP UMAN encompasses the following five tasks:

- Task 1: S/T coordination, interactions with KM WP and integration (Leader: Bel V, Belgium),
- Task 2: Strategies, approaches and tools (Leader: GRS Braunschweig, Germany),
- Task 3: Characterisation and significance of uncertainties for different categories of actors (Leader: RATEN, Romania),
- Task 4: Uncertainty management options and preferences of different actors across the various programme phases (Leader: BGE mbH, Germany),
- Task 5: Interactions between all categories of actors including Civil Society (Leader: MUTADIS, France).

The networking concept adopted in this WP and shown in Figure 1 allows for sharing the knowledge/ know-how and discussing common challenging issues among the different actors, including Civil Society, in the framework of planned workshops and seminars. Besides the interactions among the different UMAN Tasks and those with the EURAD RD&D and the other SS WPs, exchanges with other international initiatives/organisations such as NEA IGSC and IAEA are planned. The knowledge consolidated in the WP UMAN will provide a valuable input to the EURAD KM WP.



Figure 1: Interactions planned in the framework of the EURAD WP UMAN.

References

- [1] www.ejp-eurad.eu
- [2] Council Directive 2011/70/Euratom of 19 July 2011, Establishing a community framework for the responsible and safe management of spent fuel and radioactive waste (2011).
- [3] EURAD Strategic Research Agenda, www.ejp-eurad.eu/publications/eurad-sra
- [4] EURAD Roadmap, www.ejp-eurad.eu/roadmap.

Räumlich und zeitlich aufgelöste lokale und globale Sensitivitätsanalyse der Konsolidation um eine punktförmige Wärmequelle

Aqeel Afzal Chaudhry^a, Jörg Buchwald^{b,a}, Thomas Nagel^{a,c}

^aInstitut für Geotechnik, Technische Universität Bergakademie Freiberg ^bDepartment Umweltinformatik, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ, Leipzig ^cTUBAF-UFZ Zentrum für Umweltgeowissenschaften

Key words: Lokale Sensitivitätsanalyse (OVAT), Globale Sensitivitätsanalyse (GSA), Thermo-hydro-mechanische (THM) Kopplung, nicht-isotherme Konsolidierung

Für die Entsorgung nuklearer Abfälle wird typischerweise ein Multibarrierensystem verwendet, das natürliche und technische Barrieren umfasst. Der Sicherheitsbewertung und Optimierung solcher Barrieresysteme kommt aufgrund ihrer Rolle bei der Vermeidung von Umweltgefahren entscheidende Bedeutung zu. Zu diesem Zweck werden gekoppelte analytische und/oder numerische thermisch, hydraulisch, mechanische (THM) Modelle zur Analyse der hochkomplexen physikalischen Phänomene im Wirtsgestein und in den Barrierematerialien verwendet. Diese Modellierung ist nie frei von Ungewissheiten, und Sensitivitätsanalysen sowie die Quantifizierung dieser Ungewissheiten können die modellgestützte Entscheidungsfindung und das vertiefte Prozessverständnis weiter verbessern. Die Bewertung verschiedener quantitativer Verfahren für die Analyse von Ungewissheiten (UQ) und Sensitivitäten (SA), die für gekoppelte THM-Probleme im ingenieurtechnischen Maßstab geeignet sind, wird aufgrund von Nichtlinearitäten, unterschiedlichen Kopplungsebenen und großen Systemdimensionen erschwert. Für ein erstes Methoden-Screening ist es daher von Vorteil, über eine analytische Lösung zu verfügen, die den gesamten Parameterraum robust abdecken kann, die relevantesten Primärkopplungen umfasst und gleichzeitig einen geringen rechentechnischen Aufwand erfordert.

Booker und Savvidou (1985) [1] sowie Chaudhry et al. (2019) [3] stellten eine solche analytische Lösung für die Konsolidierung um eine punktförmige Wärmequelle, die in ein gering durchlässiges Medium eingebettet ist, vor. Basierend darauf wurden im Rahmen unseres Beitrags verschiedene Ansätze zur Sensitivitätsanalyse verglichen. Dies umfasste sowohl lokale (one variable at a time, OVAT) als auch globale Sensitivitätsanalysen (GSA) auf der Grundlage Sobol'scher Indizes mit verschiedenen Kombinationen aus Entfernung zur Wärmequelle und Dauer des Wärmeeintrages. Ziel war die Identifikation der Schlüsseleffekte im Nah- und Fernfeld sowie die Reaktion des Systems im frühen und späteren Stadium. Daraus lassen sich die entscheidenden Parameter und Parameterinteraktionen, die die Ergebnisse in diesen verschiedenen Domänen bestimmen, ableiten und physikalisch interpretieren.

Um zu untersuchen, wie die Sensitivität der Parameter sowohl mit der räumlichen Position als auch mit der Zeit variiert, wurden Sensitivitätskarten erstellt, bei denen die horizontale Achse dem radialen Abstand von der Wärmequelle und die vertikale Achse einer Zunahme der Zeit nach Beginn der Erwärmung entspricht. Abb. 1 zeigt die räumlich-zeitlichen Sensitivitätskarten für Sensitivitätsindizes erster Ordnung im Fall von u_r . Hier kann man deutlich die im vorigen Abschnitt erläuterte Prozesskopplung beobachten. Die Sensitivität von u_r gegenüber der Wärmeleitfähigkeit K, der Wärmekapazität Cund dem thermischen Ausdehnungskoeffizienten des Festkörperskeletts a_S ist ein klarer Hinweis auf die thermo-mechanische Kopplung. Weiterhin ist die starke Sensitivität von u_r gegenüber der intrinsischen Permeabilität k_s auf die hydro-mechanische Kopplung zurückzuführen. Ein wichtiger Effekt, der bei der OVAT-Analyse nicht beobachtet wurde (hier nicht gezeigte Ergebnisse), besteht darin, dass u_r im Laufe der Zeit nur noch gegenüber K sensitiv wird, was darauf hindeutet, dass die thermo-mechanische Kopplung die hydro-mechanische Kopplung dominiert, sobald die transiente Phase an einer bestimmten Stelle verstrichen ist.

Bisher lag der Schwerpunkt der Analysen auf den sog. primären Prozesskopplungen. Basierend auf dem in Buchwald et al. [2] vorgestellten Workflow werden die vorgestellten Analysen auf die Untersuchung der sekundären (konstitutiven) Kopplungen ausgedehnt. In die Analyse können auch experimentelle Daten einbezogen werden, so dass nur im Sinne einer anwendungsorientierten Metrik geeignete Surrogate verwendet werden, was zu einer verbesserten Einschätzung der Ungewissheiten führen kann. Die Auswirkungen dieses datenbasierten Filters [4] auf die Ergebnisse von UQ und GSA wurden ebenfalls in [2] erörtert.

Aus den Ergebnissen können anwendungsorientierte Schlussfolgerungen zu den Voraussetzungen gezogen werden, die für eine Anwendung der verschiedenen Methoden erfüllt sein sollten, sowie darüber, wie mögliche Fehlinterpretationen vermieden werden können. Die durchgeführte Analyse kann darüber hinaus als Benchmark für UQ- und SA-Software dienen, die um numerische THM-Simulatoren herum entwickelt wurde.



Abbildung 1: Räumlich-zeitliche Sensitivitätsdiagramme für Sensitivitätsindizes erster Order für u_r

Literatur

- Booker J. R., Savvidou C. Consolidation around a point heat source // International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics. 1985. 9, 2. 173–184.
- [2] Buchwald J, Chaudhry AA, Yoshioka K, Kolditz O, Attinger S, Nagel T. DoE-based history matching for probabilistic uncertainty quantification of thermo-hydro-mechanical processes around heat sources in clay rocks // International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences. 2020. 134. 104481.
- [3] Chaudhry Aqeel Afzal, Buchwald Jörg, Kolditz Olaf, Nagel Thomas. Consolidation around a point heat source (correction and verification) // International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics. 2019. 43, 18. 2743-2751.
- [4] Li Boxiao, Bhark Eric W., Gross Stephen J., Billiter Travis C., Dehghani Kaveh. Best practices of assisted history matching using design of experiments // SPE J. 2019. 24, 4. 1435–1451.

Thermische Integrität von Ton und Tonsteinen - Experiment und gekoppelte THMC-Simulation

A. Meleshyn^a, K. Jantschik^a, M. Kröhn^a, O. Czaikowski^a, L. Nguyen-Thanh^b

^aGesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Theodor-Heuss-Straße 4, 38122 Braunschweig ^bInstitute of Applied Geosciences, Technische Universität Darmstadt, Schnittspahnstr. 9, 64287 Darmstadt

Key words: Tongestein, Bentonit, Thermische Integrität, Maximaltemperatur, Quelldruck, Permeabilität

1. Einleitung

Typische Konzepte für generische Endlagerstandorte im prätertiären Tongestein sehen eine Einlagerung der Abfälle in einer Teufe von etwa 600 bis 800 Metern vor [1], wobei generell eine Einlagerungsteufe von bis zu 1500 m als ausreichend und zweckmäßig betrachtet wird [2]. Demnach könnten hochradioaktive Abfälle in Strecken oder in Bohrlöchern [1] beispielsweise in einer rund 110 bis 150 Meter mächtigen [2] tonigen Fazies des Opalinustons (Süddeutschland) als Wirtsgesteinsformation eingelagert werden. Geotechnische Barrieren und Verschlusselemente sollen dabei auf Bentonit und aufbereitetem Ausbruchmaterial basieren. Diese und angrenzendes Tongestein erfahren aufgrund erhöhter Temperaturen im Endlager und einer Wechselwirkung mit wässrigen Lösungen aus dem umliegenden Wirtsgestein eine Umwandlung, die ihre endlagerrelevanten Eigenschaften verändern kann, wie in einer Ubersicht des aktuellen Standes des Wissens zur temperaturabhängigen Umwandlung in Bentoniten und Tongestein zusammengefasst wird [3]. Daher hat der Gesetzgeber den Grenzwert von 100 °C an der Oberfläche der Abfallbehälter vorsorglich festgelegt, bis Forschungsergebnisse zum Einfluss der höheren Temperaturen auf das Wirtsgestein eine etwaige Anpassung auf einen wissenschaftlich fundierten Grenzwert ermöglichen [4]. In der vorliegenden, vom Bereich Standortauswahl der Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH prinzipiell konzipierten und beauftragten Studie, soll der gekoppelte Einfluss der Wärme und Fluidperkolation in Laborversuchen bei Temperaturen von 25 °C bis zu 200 °C und einem für die potentielle Endlagerteufe relevanten Fluiddruck von 70 bar untersucht und in thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemisch (THMC) gekoppelten Modellen simuliert werden.

2. Methodischer Ansatz

Die Zielgrößen der Untersuchung sind die mineralogische Alteration, die Permeabilität und der Quelldruck eines Bentonits und eines Tongesteins. Als Modelltongestein wurde wegen der Zugänglichkeit zur Beprobung im Untertagelabor Mont-Terri die tonige Fazies des Opalinustons und als Modellbentonit der Bayrische Bentonit, der bereits im Schachtverschluss Salzdetfurth bei einer Dichte von 1.6 g/cm^3 und bei einer Fluiddruckbelastung von bis zu 70 bar erfolgreich eingesetzt wurde [5, 6], ausgewählt. Diese Dichte soll auch für den schonend zu einem Pulver gemahlenen Bentonit und für die zerkleinerte und schonend zu einem Pulver gemahlene Probe des Opalinustons in der vorliegenden Studie eingesetzt werden. Diese Vorbereitung der Opalinustonprobe dient vor allem der Maximierung der reaktiven Fläche für die Alterationsreaktion, die in einer relativ kurzen Versuchszeit von bis zu zwei Wochen untersucht werden soll. Obwohl bei dieser Vorgehensweise der Einfluss der Anisotropie des Tongesteins auf die Permeabilität und den Quelldruck unberücksichtigt bleibt, können dennoch gemittelte, Anisotropie-unabhängige Kennwerte des Opalinustons, die für das als Barriere- und Verschlusselementmaterial vorgesehene aufbereitete Ausbruchmaterial relevant sind, bestimmt werden. Durch die gleiche Probenart wird zudem der Vergleich der Alterationsreaktionen in den beiden untersuchten Tonen begünstigt. Die Proben werden direkt in den starren Oedometerzellen verdichtet und mit der synthetischen Opalinustonporenlösung aufgesättigt und perkoliert. Die Verwendung einer starren Oedometerzelle ist vorgesehen, um gleichzeitig Permeabilität und Quelldruck messen zu können. Durch den Einsatz von pulverförmigen, direkt in der

Oedometerzelle verdichteten Tonproben werden die Umläufigkeiten entlang der Kontaktfläche zwischen der Probe und der Zellwandung verhindert.

Die Durchführung von Laborexperimenten mit bis zu 200 °C erhitzbaren Durchströmungszellen bei hohen Fluiddrucken stellt besondere Anforderungen an den Aufbau der Laborexperimente, wie z.B. in [7] dokumentiert ist. In der vorliegenden Studie wird daher ein alternativer Ansatz verfolgt, der vom Aufbau den in [8] und [9] beschriebenen Ansätzen ähnelt, wobei anstelle einer Hassler-Zelle eine eigens für diese Versuche entwickelte Miniatur-Oedometerzelle eingesetzt wird. Das Versuchskonzept (Abb. 1) sieht die Aufsättigung der entlüfteten Probe bei 70 bar und anschließende Durchflussmessungen bei den Fluiddruckgradienten von 5, 10, 15 und 20 bar mit dem mittleren Fluiddruck von 70 bar in der Probe vor. Die in die Probe injizierten bzw. aus der Probe extrahierten Lösungsvolumina werden zur Durchflussbestimmung erfasst. Die Permeabilität wird direkt als Neigung der linearen Abhängigkeit des Durchflusses vom Fluiddruckgradienten bestimmt. Mit den fünf Temperaturen (25, 60, 100, 150 und 200 °C) und zwei Probenarten (Bentonit, Tongestein) werden insgesamt 10 Versuchsbedingungen realisiert, wobei jede Versuchsbedingung in dreifacher Wiederholung zur Ermittlung von Unsicherheiten untersucht wird.



Figure 1: Konzept des THMC-Versuchs

Nach den Versuchen werden mineralogische, mikroskopische und spektroskopische Analysen der Proben am Institut für Angewandte Geologie (TU Darmstadt) zur Erfassung von chemischen und mineralogischen Auswirkungen der Alterationsreaktion durchgeführt. Anhand der Analyseergebnisse und der Ergebnisse aus dem THMC-Versuch soll der THMC-Versuch mit dem open-source Code PhreeqC und der THEREDA-Datenbasis als eine vereinfachte Transportrechnung simuliert werden, bei der die Interaktion zwischen dem durchströmten Porenraum und der Festphase des Tons im Modell abgebildet wird. Anhand des Modells soll auf modelltheoretischer Ebene untersucht werden, welche Phasen sich durch die Interaktion zwischen Fest- und Flüssigphase auflösen oder ausfallen. Die Auflösungs- und Ausfällungsprozesse beeinflussen die Porosität und können sich somit ebenfalls auf die hydraulische Durchlässigkeit des Tons auswirken. Anhand einer Massenbilanz zwischen Phasenbildung und -auflösung kann eine Abschätzung über die Entwicklung der Permeabilität getroffen werden.

Acknowledgement

Die Autoren bedanken sich bei der BGE (Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH) für die Finanzierung dieses Forschungsvorhabens.
- Jobmann, M., Bebiolka, A., Jahn, S., Lommerzheim, A., Maßmann, J., Meleshyn, A., Mrugalla, S., Reinhold, K., Rübel, A., Stark, L., & Ziefle, G., Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager im Tongestein in Deutschland – Synthesebericht, Projekt ANSICHT, Ber.-Nr.: TEC-13-2016-AB, DBE TECHNOLOGY GmbH, BGR, GRS; Peine, Hannover, Braunschweig (2017).
- BGE. Anwendung Mindestanforderungen gemäß § 23 StandAG. Untersetzende Unterlage zum Zwischenbericht Teilgebiete. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (2020).
- [3] Bracke, G., Hartwig-Thurat, E., Larue, J., Meleshyn, A., & Weyand, T. Untersuchungen zu den "maximalen physikalisch möglichen Temperaturen" gemäß § 27 StandAG im Hinblick auf die Grenztemperatur an der Außenfläche von Abfallbehältern. BfE-RESFOR-003/19, urn:nbn:de:0221-2019111520402, GRS-A-3948, GRS, Köln (2019).
- [4] § 27 Abs. 4 des Standortauswahlgesetzes vom 5. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), das zuletzt durch Artikel 247 der Verordnung vom 19. Juni 2020 (BGBl. I S. 1328) geändert worden ist.
- Breidung, K. P. Verwahrung von Kali- und Steinsalzbergwerken einschlie
 ßlich langzeitsicherer Schachtabdichtungen. Kali und Salz 2, 28–39 (2002).
- [6] Sitz, P., Gruner, M., Rumphorst, K. Bentonitdichtelemente f
 ür langzeitsichere Schachtverschl
 üsse im Salinar. Kali und Salz 3, 6–13 (2003).
- [7] Daniels, K., Harrington, J., Zihms, S., Wiseall, A. Bentonite permeability at elevated temperature. Geosciences 7, 3 (2017).
- [8] Launay, G., Sizaret, S., Guillou-Frottier, L., Fauguerolles, C., Champallier, R., Gloaguen, E. Dynamic Permeability Related to Greisenization Reactions in Sn-W Ore Deposits: Quantitative Petrophysical and Experimental Evidence. Geofluids 2019 (2019).
- [9] Boulin, P. F., Bretonnier, P., Gland, N., & Lombard, J. M. Contribution of the steady state method to water permeability measurement in very low permeability porous media. Oil & Gas Science and Technology–Revue d'IFP Energies nouvelles, 67(3), 387-401 (2012).

Safety Analytical Investigations of Repository Systems in Crystalline $$\operatorname{Rock}$

J. Flügge^a, A. Hassanzadegan^b, M. Johnen^a, Ch. Müller^b, J. Sönnke^c, H. Zhao^a

^aGesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGbmH, Braunschweig, Germany ^bBGE Technology, Peine, Germany ^cBundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover, Germany

Key words: Crystalline Rock, Fracture Networks, Regional Numerical Modelling

1. Introduction

In May 2017 the revision of the German Repository Site Selection Act (German acronym StandAG [1]) came into force. The site selection procedure needs to be unbiased, starting from a blank map of Germany without pre-excluding or pre-selecting specific host rock formations. Thus, salt formations, as well as clay and crystalline formations are to be considered. For crystalline rock, special questions have to be addressed in the safety case. These refer to the geological survey and site investigation, the identification of discontinuities, and the groundwater flow and pollutant transport, among others. Handling discontinuities in groundwater flow and transport models is currently being investigated exemplarily for the Yeniseysky site in the Krasnoyarsk region (Siberia, Russia), where an underground research laboratory (URL) will be installed, and for a generic site in Germany.

2. Integration of discontinuities in numerical models

In general, crystalline rock is impermeable for groundwater flow and pollutant transport. However, different orders of discontinuities may be existent, from macro to micro scale, which are potential paths for groundwater flow and transport and may cause a considerable increase of the rock permeability. The integration of discontinuities in numerical models can be realised using discrete fracture network (DFN) models or equivalent porous media (EPM) models [2]. For regional hydrogeological models, the special challenge is to develop a method, which provides adequate accuracy on the one hand and reasonable computing times on the other hand. One of the approaches is described by Oda (1985 [3]), who is upscaling the permeability of the fractures by introducing a permeability tensor for discontinuous rock masses. In our work, different modelling approaches are being tested and investigated for their suitability. The aim is to use a hybrid approach, where a DFN of small scale fractures is mapped onto a regular grid (stochastic continuum model – SCM), while the larger scale discontinuities are integrated in the model as equidimensional elements.



Figure 1: Representation of fractures in a stochastic continuum model

Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021

3. Application to a reginal generic model

A generic regional hydrogeological model is used to investigate the applicability of different methods for large-scale problems. First results indicate, that handling large-scale problems using an upscaling approach is generally feasible, whereas greatest care has to be given to the selection of the model area and the cell size, which considerably affect the resulting fracture connectivity and thus the groundwater flow and transport. First modelling results show that the dispersivity and the sorption coefficient are parameters with a high impact on radionuclide transport. Future work will include a comparison of the results using different codes and a variation of the model parameters in order to illustrate the influence of different approaches on the modelling of flow and transport processes and to determine their impact on performance assessments for high-level nuclear waste disposal in crystalline rock.

Acknowledgements

This work was financed by the German Ministry for Economic Affairs and Energy (BMWi) under the contract numbers 02 E 11577A/B and 02 E 11617A/B.

- StandAG: Standortauswahlgesetz vom 5. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), das zuletzt durch Artikel 247 der Verordnung vom 19. Juni 2020 (BGBl. I S. 1328) geändert worden ist
- [2] Dietrich, P.; Helmig, R.; Sauter, M.; Hötzl, H.; Köngeter, J.; Teutsch, G.: Flow and Transport in Fractured Porous Media. 447 p., Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2005
- [3] Oda, M., Permeability tensor for discontinuous rock masses, Géotechnique, 35, 483-495 (1985)

Risk to radioactive waste repositories from heavy rainfall and flooding

C. Mudersbach^a, F. Simon^a

^a aBochum University of Applied Sciences, Institute for Hydraulic Engineering and Hydromechanics, Am Hochschulcampus 1, 44801 Bochum, christoph.mudersbach@hs-bochum.de

Key words: flood protection, heavy rainfall, compound event

1. Introduction

Nuclear facilities are to be protected against flooding in accordance with safety standard KTA 2207 "Protection of Nuclear Power Plants against Flooding" [1]. Several influencing factors have to be considered [2, 3]. In the case of sites near rivers, for example, retention effects in the catchment area or the failure of dams have to be accounted for. In particular, special emphasis is placed on the analysis of event combinations of heavy rainfall events and river flooding, so called compound events. The main question here is whether the events can occur simultaneously and how they must be superimposed physically, but also in terms of probability theory.

The analysis of flooding events from a combination of heavy rainfall events and river floods represents a spatially variable and non-linear process. While river floods can be better localised geographically, heavy rainfall events can lead to flooding conditions almost everywhere. For smaller catchment areas, a high degree of deterministic dependence between heavy rainfall events and river flooding can be assumed. In large river basins, on the other hand, almost no physically based correlation between the two events can be identified. In a large number of geographical locations, however, there is a slight to moderate correlation, which must be taken into account when analysing the hazard situation caused by this combination of events.

2. Methods and Results

In an ongoing BMBF research project ProComE, statistical analyses for the event combination of heavy rainfall and river flooding are being carried out throughout Germany at the Department of Hydraulic Engineering and Hydromechanics at Bochum University of Applied Sciences. Station data as well as radar data of the DWD are used for the precipitation. For the runoff data, data from the Global Runoff Data Centre (GRDC) are used. A central component of the project is the analysis of the statistical dependence structures between the two event types (Fig. 1), whereby space- and time-variant effects must be taken into account. For the probabilistic description of the event combinations Copula functions [4] are used, which allow an extreme value statistical analysis of correlated data.

First results show, that the dependencies between the two event types could be calculated for many sites and that initial working hypotheses could be confirmed. However, due to the limited availability of precipitation data from radar data on the one hand and spatial distance from river gauges and precipitation stations on the other hand, uncertainties in the results arise. It could also be shown that the existing correlations are significant and therefore the application of Copula functions is essential for a probabilistic assessment.

The results indicate that the analysis of the combination of heavy rainfall and flooding events is of importance for nuclear facilities in order to be able to reliably determine the hazard situation of these sites.



Figure 1: Correlation between heavy rainfall and flooding events for 30 sites with different catchment sizes.

- [1] KTA 2207 (2004): Schutz von Kernkraftwerken gegen Hochwasser.
- [2] Jensen, J.; Frank, T.; Mudersbach, C.; Schubert, B.; Wörner, M. (2008): Protection of Nuclear Power Plants against Flooding - Considerations for the Determination of a 10.000 Years Return Period Flood between Tidal and Inland River Regimes. In: Tsu-Mu Kao, E. Zio und Vincent Ho (Hg.): Proceedings of the 9th International Conference on Probabilistic Safety Assessment and Management (PSAM 9). 18 - 23 May 2008, Hong Kong, China; an IAPSAM conference. International Association for Probabilistic Safety Assessment and Management. Hong Kong.
- [3] emphJensen, J.; Meiswinkel, R.; Barg, G.; Frank, T.; Mudersbach, C.: Hochwasserschutz Anwendung der neuen KTA2207 zur Bestimmung des Bemessungshochwassers. In: Tagungsbericht der Jahrestagung Kerntechnik 2007.
- [4] Bender, J.; Jensen, J.; Mudersbach, C.; Klein, B.; Rothe, B. (2018): Multivariate Wahrscheinlichkeiten: ein Mehrgewinn - nicht nur für die Wissenschaft. In: KW - Korrespondenz Wasserwirtschaft 11 (3), S. 160–165. DOI: 10.3243/kwe2018.03.005.

Welche Prozesse könnten zur Festlegung einer "Grenztemperatur" an der Außenfläche von Behältern in einem Endlager zugrundegelegt werden?

G. Bracke, E. Hartwig-Thurat, J. Larue, A. Meleshyn, T. Weyand

Gesellschaft für Reaktor- und Anlagensicherheit mbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln

Key words: Grenztemperatur, Endlager, Behälter, Prozesse

1. Einleitung

Das Standortauswahlgesetz (StandAG § 27 (4) [1]) gibt eine vorläufige "Grenztemperatur" von 100 °C an der Außenfläche der Abfallbehälter von hoch radioaktiven Abfällen im Endlager vor. Es führt weiter aus, dass das vorbehaltlich der Ergebnisse weiterer Forschungsarbeiten zu sehen ist. Die Wirkung der Wärmeabgabe der hoch radioaktiven Abfälle muss für den Betrieb und die Langzeitsicherheit eines Endlagers berücksichtigt werden. Daher sind (maximale) Auslegungstemperaturen für die Komponenten eines Endlagers notwendig.

Da die regulatorische Vorgabe einer Auslegungstemperatur als "Grenztemperatur" an der Außenfläche der Behälter im StandAG starke Auswirkungen auf die Standortauswahl (z. B. Raumbedarf des Endlagerbergwerkes, Mächtigkeit des ewG), die zukünftigen Endlagerkonzepte und die vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen in allen Wirtsgesteinen (Steinsalz, Ton- und Kristallingestein) haben kann, empfahl Röhlig [2] eine Intensivierung von Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zur Thematik "Grenztemperaturen". Diese sollten über die bisherigen Studien zu den Wirtsgesteinen, die bereits eine Wärmeverträglichkeit potentieller Wirtsgesteine in Deutschland untersucht und analysiert haben [3], [4], [5], [6], [7], [8] hinausgehen.

Der nachfolgende Beitrag stellt daher zusammenfassend auf Basis der Literaturstudie [9], die im Auftrag des Bundesamtes für Sicherheit in der nuklearen Entsorgung (BASE) erstellt wurde, temperaturabhängige und gekoppelte thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemische-biologische Prozesse (THMCB-Prozesse) vor, die in einem Endlager als relevant für eine Festlegung einer "Grenztemperatur" angesehen werden könnten und diskutiert das weitere Vorgehen.

2. Aufbau eines Endlagers und Temperaturentwicklung

Ein Endlager in einer geologischen Formation kann schematisch in mehrere Komponenten untergliedert werden, hier z.B. Abfall, Behälter, Abfallgebinde, Versatz / Buffer, Verschlüsse, Wirtsgestein, geologische Umgebung. Der Wärmeeintrag des hoch radioaktiven Abfalls nach der Einlagerung betrifft diese Komponenten in unterschiedlicher Weise zeitabhängig (siehe Abb. 1).

Die Temperatur an der Außenfläche des Behälters ist dabei abhängig von der Beladung der Behälter, der Wärmeleistung der Abfälle über die Zeit (nach Abbrand und Zwischenlagerung), der Lagerung, den thermischen Materialeigenschaften der geotechnischen Barrieren sowie des Wirtsgesteins und dem Temperaturgradienten der geologischen Umgebung. Zur Bestimmung der (maximalen) Temperaturen an der Außenfläche des Behälters erfolgen sog. Temperaturfeldberechnungen (numerische Modellrechnungen). Mittels Temperaturfeldberechnungen wird die sich zeitlich und räumlich ändernde Temperaturverteilung im Endlagerbergwerk sowie im Wirtsgestein bzw. der geologischen Umgebung infolge des Wärmeeintrages der Abfallgebinde berechnet (siehe Abb. 1).



Figure 1: Temperaturentwicklung in einem Endlager (Bildquelle [9]).

Abb. 2 zeigt ein schematisches Temperaturprofil, das sich nach der Einlagerung, ausgehend von der Außenfläche eines Behälters, in den technischen Komponenten sowie im Wirtsgestein zu einem Zeitpunkt x einstellen kann. Für den hypothetischen und vereinfachten Fall der Einlagerung eines einzelnen Behälters/Abfallgebindes in einer Strecke ist die höchste Temperatur an der Außenfläche des Behälters zu erwarten. Diese soll eine festzulegende Grenztemperatur nicht überschreiten. In Abhängigkeit der thermischen Materialeigenschaften der weiteren Endlagerkomponenten sinkt die Temperatur mit zunehmender Distanz zur Wärmequelle mehr oder weniger deutlich ab. Da die thermischen Eigenschaften der einzelnen Endlagerkomponenten verschieden sind, ist der Temperaturgradient auch unterschiedlich.



Figure 2: Skizze des schematischen Temperaturprofils im Querschnitt einer exemplarischen Einlagerungsstrecke für einen eingelagerten Behälter (Bildquelle [9]).

Abb. 3 zeigt schematisch die Temperatur an der Außenfläche eines einzelnen Behälters (blau) und mehrerer Behälter im Einlagerungsfeld (rot) abhängig von der Zeit. Die Temperatur erhöht sich nach der Einlagerung zunächst bis zu einem Maximum und sinkt dann aufgrund der abnehmenden Wärmeproduktion wieder ab. Im Vergleich zu der Temperatur eines einzigen Behälters (blau) steigt die Temperatur an der Außenfläche eines Behälters mitten in einem Einlagerungsfeld (rot) aufgrund der Überlagerung des Wärmeflusses mehrerer Behälter stärker an und die maximale Temperatur wird erst zu einem späteren Zeitpunkt erreicht.

Die in Abb. 3 gezeigte Auslegungstemperatur für die Außenfläche eines Behälters in einem Endlager im Steinsalz kann aus Anforderungen des jeweiligen Endlagerkonzeptes für andere Komponenten resultieren, aber auch identisch mit der "Grenztemperatur" sein. Die Auslegungstemperatur wird in der Regel von der maximalen Temperatur im Endlager in den Modellrechnungen mit einer Sicherheitsmarge unterschritten, da diese als maximale Temperatur verstanden wird. Minimale Auslegungstemperaturen in Endlagerkonzepten sind bisher nicht bekannt.



Figure 3: Temperatur an der Außenfläche eines Behälters abhängig von der Zeit (modifiziert nach [10].

DBETEC [10] ermittelte den Flächenbedarf für Endlager in den verschiedenen Wirtsgesteinen auf Basis des Abfallinventars des Nationalen Entsorgungsprogramms [11] für verschiedene Temperaturen an der Außenfläche der Behälter (Tab. 1). Der geringste Flächenbedarf ergab sich für Endlager im Steinsalz (steile Lagerung) bei einer Auslegungstemperatur von 200 °C. Auch der Vergleich der Wirtsgesteine Steinsalz, Tongestein und Kristallingestein (hier Granit) bei einer einheitlichen Auslegungstemperatur von jeweils 100°C ergab für ein Endlager im Steinsalz den geringsten Flächenbedarf. Der unterschiedliche Flächenbedarf beruht auf der unterschiedlichen Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität des Wirtsgesteins sowie des gewählten Versatzmaterials. Je nach Wirtsgestein unterschieden sich zudem auch die notwendigen Pfeilerbreiten, die für die Grubenstabilität benötigt werden.

3. Temperaturabhängige THMCB-Prozesse

Ausgehend vom Anfangszustand eines Endlagerstandortes und mit dem entsprechenden wissenschaftlichen Verständnis der Faktoren (hier FEP-Kataloge), die das Endlager beeinflußen können, sind zukünftig mögliche bzw. zu erwartende Entwicklungen in Sicherheitsanalysen ableitbar (Abb. 4). Diese Faktoren

	Einheit	Salz	Salz	Kristallin	Ton
Auslegungstemperatur	$^{\circ}\mathrm{C}$	200	100	100	100
Fläche	$\rm km^2$	0.80	1.63	2.21	4.87
Fläche für Sicherheitsabstand	$\rm km^2$	0.23	0.40	1.03	1.08
Fläche für Infrastruktur	$\rm km^2$	0.25	0.25	0.32	0.63
Gesamtfläche	km^2	1.28	2.28	3.56	6.58

Table 1: Wirkung von Auslegungstemperaturen auf generische Endlagerkonzepte [10].

sind als "Features, Events and Processes" (FEP, deutsch: Zustände, Eigenschaften und Prozesse) systematisch in Datenbanken dokumentiert, den sogenannten FEP-Katalogen. Mit Kenntnis der Abhängigkeiten erfolgt dann die Szenarienentwicklung, die die Basis der (vorläufigen) ggfs. numerischen Sicherheitsanalysen bildet. Die Erstellung und Anwendung von FEP-Katalogen zur Szenarienentwicklung für Sicherheitsanalysen gelten gegenwärtig als Stand von W&T.

Die thermo-hydraulischen, mechanischen, chemischen und biologischen Prozesse (THMCB-Prozesse), die die Sicherheitsanalyse in numerischen Modellierungen untersucht, sind somit in FEP-Katalogen dokumentiert. FEP-Kataloge streben eine möglichst vollständige Darstellung entweder auf generischer [12], [13], [14], [15] oder auf standortspezifischer Basis [16], [17], [18] an.



Figure 4: Bausteine einer Sicherheitsanalyse

FEP-Kataloge liegen in Deutschland für Steinsalz (Projekt VSG [16], [19], [20]) und Tongesteine (Projekt ANSICHT [17]) vor, beziehungsweise werden für Kristallingestein [21] erarbeitet. Die Differenzierung der FEP-Kataloge innerhalb Europas ist allerdings nicht einheitlich erfolgt. So liegt dem FEP-Katalog aus Schweden für Kristallingesteine mit dem Top-Down-Ansatz [18] eine deutlich abweichende Systematik im Vergleich zu den anderen für Deutschland genannten FEP-Katalogen mit einem Bottom-Up-Ansatz zugrunde. Als Top-Down-Ansatz wird die Ableitung von Szenarien ausgehend von Sicherheitsfunktionen bezeichnet, als Bottom-Up-Ansatz hingegen die Ableitung von Szenarien ausgehend von der Beschreibung der Entwicklung des Endlagersystems bzw. der ablaufenden Prozesse [22].

Grundsätzlich beeinflusst jede Temperaturänderung alle ablaufenden Prozesse (Hydraulik, Mechanik, Chemie, Mineralogie, Biologie) gleichzeitig, so dass ein gesamtes Systemverhalten nur als thermohydromechanisch-chemisch-biologisch gekoppeltes System verstanden werden kann. Daher ist eine Identifizierung der wesentlichen Prozesse wichtig.

Temperaturabhängige Prozesse und Eigenschaften sind :

- Hydraulik: Viskosität, Dichte, Oberflächenspannung, relative Permeabilität,
- Mechanik: Festigkeitseigenschaften, Rissbildung durch Austrocknung, Quellfähigkeit,
- Chemie: Illitisierung, Mineralzusammensetzung, Sorptionfähigkeit, diffusiver Transport, Kationenaustausch, pH-Wert,
- Biologie: Wachstumsraten, Populationsdichte.

4. Prozesse und Eigenschaften im Wirtsgestein Steinsalz

Die thermischen Materialeigenschaften von Steinsalz, hier eine hohe Wärmeleitfähigkeit und eine gleichzeitig hohe spezifische Wärmekapazität, werden als günstige Eigenschaften bewertet. Die durch radioaktive Abfälle erzeugte Zerfallswärme kann gut aufgenommen und in das umgebende Wirtsgestein abgeleitet werden. Die Wärmeableitung ist jedoch kein wichtiger sicherheitsrelevanter Prozess, da diese über die Beladung und Lagerung der Behälter leicht Berücksichtigung finden kann.

Als wichtige temperaturabhängige Prozesse im Steinsalz werden angesehen (siehe auch Abb. 5):

Ein Temperaturanstieg beschleunigt das Salzkriechen und demzufolge die Schließung von Hohlräumen durch Konvergenz. Durch das Schließen der Hohlräume werden Spannungsunterschiede zwischen dem Endlagerbauwerk und dem umgebenden Wirtsgestein abgebaut. Der Selbstheilungseffekt (z. B. Rissverheilung) des Salzes wird durch hohe Temperaturen unterstützt. Ähnliches gilt für die Kompaktion von Salzgrus. Höhere Temperaturen führen bei gleichem Druck zu einer geringeren Porosität.

Eine thermisch induzierte Volumenexpansion des Gesteins kann potentiell zu einer Verletzung des Fluiddruckkriteriums führen und somit die Integrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs eines Endlagers im Steinsalz gefährden. Verstärkt werden kann dieser Effekt durch größere Fluideinschlüsse im Steinsalz, da diese höhere thermische Ausdehnungskoeffizienten als das Wirtsgestein besitzen. Bisherige Untersuchungen für Endlager im Salzgestein zeigten bei einer Auslegungstemperatur von 200 °C allerdings keine Integritätsgefährdung des einschlusswirksamen Gebirgsbereiches auf [23]. Die Auswirkung einer thermisch induzierten Volumenexpansion sollte standortspezifisch beurteilt werden, um eine Integritätsgefährdung auszuschließen.

Bei Temperaturen über 121 °C wird nach aktuellem Kenntnisstand eine mikrobielle Aktivität auch von halotoleranten und halophilen Mikroorganismen grundsätzlich verhindert. In Bereichen mit geringeren Temperaturen ist grundsätzlich eine Überlebensfähigkeit von Mikroorganismen möglich und eine mikrobielle Aktivität und die damit verbundene Gasbildung und mögliche Korrosionsbeschleunigung kann nicht vollständig ausgeschlossen werden. Nach aktuellem Kenntnisstand liegt die optimale Wachstumsrate von halotoleranten und halophilen Mikroorganismen (unter den zu erwartenden anaeroben Bedingungen) in einem Endlager zwischen ca. 35 °C bis 55 °C. Daher sollte die mikrobielle Aktivität insbesondere in den Bereichen eines Endlagers im Steinsalz näher betrachtet werden. Eine niedrige Temperatur an der Außenfläche eines Behälters begünstigt die mikrobielle Aktivität in unmittelbarem Nahfeld, die bei einer hohen Temperatur dagegen ausgeschlossen werden kann. Die Definition einer minimal notwendigen Temperatur in einem Endlagerkonzept könnte beispielsweise eine Gasbildung und Korrosionsbeschleunigung infolge mikrobielle Aktivität vermeiden.

Ein Wärmeeintrag in das Wirtsgestein Steinsalz bei Anwesenheit von Hydratsalzen (z. B. Polyhalit) im Wirtsgestein führt bei Erreichen einer mineralspezifischen und u. a. druckabhängigen Temperatur zur Zersetzung bzw. Umwandlung des Hydratsalzes und somit zur Kristallwasserfreisetzung. Freigesetztes Kristallwasser kann ein potentielles Transportmedium für Radionuklide sein und die Abnahme des Feststoffvolumens kann zu Fluidwegsamkeiten führen. Daher sollten in Sicherheitskonzepten ausreichende Abstände zu hydratsalzhaltigen Formationen gefordert werden, um die Temperatur¬einwirkung auf Hydratsalze so zu begrenzen, dass Zersetzungen bzw. Umwandlungen ausgeschlossen werden können. Die thermische Zersetzung von Hydratsalzen ist in den Sicherheitskonzepten ein Kriterium für die Festlegung der maximalen Temperatur am Ort der Hydratsalze.

Die thermochemische Sulfatreduktion und thermische Zersetzung werden bei höheren Temperaturen ab 120 bis 160 °C bedeutend. Diesen Prozessen kann ebenfalls durch Sicherheitsabstände zu den entsprechenden Vorkommen von Hydratsalzen Rechnung getragen werden.

Mit Hilfe von Auslegungsberechnungen könnten standortspezifisch mögliche Sicherheitsabstände und Temperaturen an der Außenfläche eines Behälters berechnet und begründet werden. In den bisherigen vorläufigen Endlagerkonzepten sind Temperaturen von mehr als 100 °C (z. B. 200 °C) angenommen worden [24], [25], [26].



Figure 5: Temperaturabhängigkeit wichtiger Prozesse im Steinsalz [9]

5. Prozesse und Eigenschaften im Wirtsgestein Tongestein

Als sicherheitstechnische günstige Eigenschaften von Tongestein in Sicherheitskonzepten gelten die Sorptionsfähigkeit für Radionuklide und die geringe Wasserdurchlässigkeit. Diese Eigenschaften können durch temperaturabhängige Prozesse beeinflusst werden.

Als wichtige temperaturabhängige Prozesse im Tongestein werden angesehen (siehe auch Abb. 6):

Mit einem Temperaturanstieg ändert sich die Zusammensetzung und Aktivität einer mikrobiellen Population. Erst ab ca. 121°C kommt wie auch in anderen Wirtsgesteinen jegliche mikrobielle Aktivität zum Erliegen. Sorption und Kolloidbildung werden durch einen Temperaturanstieg in ihrer Ausprägung ebenfalls beeinflusst, wobei die Wechselwirkung mit der Lösungszusammensetzung wichtig ist.

Feste und flüssige Bestandteile eines Tongesteins bzw. eines Bentonits erfahren bei einem Temperaturanstieg eine Expansion, die wiederum unter bestimmten Bedingungen in einer Kontraktion des erhitzten Bereichs (z. B. bei Wasserabgabe) resultieren kann.

Ab ca. 50 °C kann CO₂ aus Tonen desorbieren, die Zersetzung von Karbonat-Mineralen erfolgen, die Smektit-Illit-Reaktion beginnen und die Quarz-Zementation stattfinden.

Ein weiterer Temperaturanstieg beschleunigt Umwandlungen der Tonminerale, der sonstigen Minerale und der organischen Bestandteile eines Tongesteins bzw. eines Bentonits unter CO_2 -/H₂S-Freisetzung und weiterer Reaktionen wie die Wasserdampf-Bentonit-Reaktion, thermochemische Sulfatreduktion, H2-induzierte Pyrit-Reduktion und die Kerogenpyrolyse.

Ein Temperaturanstieg über bestimmte Temperaturen im Tongestein und Bentonit hinaus kann so zu einer irreversiblen Beeinträchtigung der sicherheitsrelevanten Eigenschaften des umgebenden Tongesteins bzw. der Bentonit-basierten Barrieren führen. Im Hinblick auf das Wirtsgestein Tongestein können die irreversible Umwandlungen der Tonminerale, der sonstigen Minerale und der Organika, die Expansion und Kontraktion sowie mikrobielle Prozesse als sehr relevant angesehen werden (s. Abb. 6). Diese Prozesse beginnen bereits bei vergleichsweise niedrigen Temperaturen und können mit der Auswahl des Tongesteins und der Barrierematerialien minimiert werden. Bei einem zukünftigen Endlagerkonzept sollten diese Prozesse bei der Auslegung eines Endlagers und zur Festlegung von Temperaturen an der Außenfläche von Behältern berücksichtigt werden. Weitere temperaturabhängige Prozesse, z. B. Sorption und Kolloidbildung, werden durch eine Temperaturänderung in der Regel reversibel beeinflusst und sind für Festlegungen von Temperaturen vermutlich von geringerer Bedeutung.



Figure 6: Temperaturabhängigkeit wichtiger Prozesse im Tongestein [9]

6. Prozesse und Eigenschaften im Wirtsgestein Kristallingestein

Kristallingestein war während seiner Genese sehr hohen Temperatureinwirkungen über sehr lange Zeiträume ausgesetzt. So sind zum Beispiel die Gesteinseinheiten im Bereich der Kontinentalen Tiefbohrung durch eine sogenannte Mitteldruck-Metamorphose bei ca. 600 - 800 MPa und 650 - 700 °C geprägt [27]. Daher sind für das eigentliche Wirtsgestein Kristallingestein im Bereich der diskutierten Auslegungstemperaturen in Endlagerkonzepten kaum sicherheitsrelevante THMCB-Prozesse zu erwarten. Die Eigenschaften von Kristallingestein mit einer hohen Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität (wie z. B. in [28], [29] beschrieben) werden in Modellrechnungen für eine Temperaturauslegung berücksichtigt.

Mögliche Begründungen für Temperaturbegrenzungen an Behälteroberflächen aus temperaturabhängigen Prozessen ergeben sich eher aus den verwendeten Materialien im Endlager und der (geotechnischen) Barrieren (z. B. Bentonit, Behälter), Fluiden (geochemisches Milieu) und vorhandenen Kluftfüllungen, insofern letzteren eine sicherheitsrelevante Barrierefunktion zugewiesen wird.

Mögliche Endlagerkonzepte im Kristallingestein skizziert Abb. 7. Neben einem Konzept mit überlagernden einschlusswirksamen Gebirgsbereich (EWG) als wichtigste Barriere, einem Konzept mit einer Barrierenfunktion der Behälter (z. B. KBS-3) ist auch ein Konzept mit mehreren einschlusswirksamen Gebirgsbereichen in kluftfreien Bereichen des Kristallingesteins denkbar.

In allen möglichen Endlagerkonzepten im Wirtsgestein Kristallingestein wird Bentonit als Buffer eingesetzt und diesem eine wesentliche Barrierefunktion zugewiesen. Grundsätzlich gelten daher die für Tongestein genannten Temperaturabhängigkeiten und -begrenzungen auch für Endlagerkonzepte im Kristallingestein insoweit diese Konzepte tonhaltige Buffer als Barrieren berücksichtigen. Ablaufende temperaturabhängige Prozesse tonhaltiger Barrieren sind bereits beschrieben (Mikrobielle Aktivität, Aufsättigungs- und Quellverhalten, Strömungsvorgänge, Diffusion). Da Konzepte (KBS-3) im Wirtsgestein Kristallingestein (Schweden, Finnland) für die Langzeitsicherheit nur die tonhaltigen Buffer und Kupfer-Behälter als wesentliche geotechnische Barrieren im Nahfeld berücksichtigen, sind hier geringere Temperaturen zur Auslegung eines Endlagers angesetzt worden als dies im Vergleich zu Konzepten im Wirtsgestein Tongestein (Schweiz) erfolgt ist. Für Kluftfüllungen im Kristallingestein sind die temperaturabhängigen, hydrothermalen Alterationsprozesse von Interesse. Falls den Eigenschaften der Kluftfüllungen eine sicherheitsrelevante Barrierefunktion (z. B. Sorption) in einem zukünftigen Endlagerkonzept zugewiesen wird, müsste mittels Ausbreitungsrechnungen und Temperaturfeldberechnungen daraus eine Grundlage zur Festlegung von Temperaturen an der Außenfläche von Behältern abgeleitet werden, um z. B. unerwünschte Mineralumwandlungen zu vermeiden.



Figure 7: Drei Konzepte: Überlagernder EWG, Behälterkonzept (KBS-3), mehrfacher EWG [30]

7. Zusammenfassung

Die Literaturrecherche und -auswertung zu THMCB-Prozessen für die Wirtsgesteine Steinsalz, Tongestein und Kristallingestein auf Basis von FEP-Katalogen ergab mehrere relevante Einzelprozesse, die zu einer zukünftigen Festlegung von Temperaturen beitragen können. Diese sind in den Abb. 5 und Abb. 6 für Steinsalz und Tongestein dargestellt. Mit Ausnahme eines noch im Detail zu bewertenden Temperaturverhaltens von Kluftfüllungen, falls diesen in Sicherheitskonzepten für Endlagersysteme im Kristallingestein wesentliche rückhaltende Eigenschaften zugeschrieben werden, stimmen die wesentlichen temperaturabhängigen Prozesse für Kristallingestein mit denen für Tongestein überein.

8. Diskussion und Schlussfolgerung

Das StandAG [1] erwartet im § 27 (4) für eine spätere Festlegung einer "Grenztemperatur" Ergebnisse noch ausstehender Forschungsarbeiten für die jeweiligen Wirtsgesteine.

Temperaturen - bezogen auf die Außenfläche der Behälter und zur Endlagerauslegung angewendet – in Endlagerkonzepten anderer Länder liegen zwischen ca. 80 bis 230 °C [9]. Insgesamt erscheint dieser Temperaturbereich bereits wegen der notwendigen Handhabbarkeit von Behältern z. B. bei einer Rückholung und im Hinblick auf die einzelne Prozesse und deren Wechselwirkung plausibel. Eine weitere Einengung oder Ausweitung dieser Spanne erscheint nicht erforderlich.

Die Ergebnisse der Literaturstudie [9] zeigen aber, dass eine Vielzahl temperaturabhängiger Eigenschaften und Einzelprozesse in den unterschiedlichen Wirtsgesteinen vorliegen. Allerdings lässt sich für kein Wirtsgestein aus einem Einzelprozess eine sicherheitstechnisch begründbare Temperatur für die Außenfläche der Behälter ohne Sicherheits- und Endlagerkonzept ableiten, da komplexe Wechselwirkungen der temperaturabhängigen Eigenschaften und Prozesse vorhanden sind. Aus Sicht der Autoren sollten daher durch numerische Sicherheitsanalysen Aspekte der betrieblichen Sicherheit, der Einschluss der Radionuklide oder Radionuklidfreisetzung in die Umwelt in dieser Hinsicht untersucht werden. Mittels einer numerischen Analyse nach Stand von Wissenschaft und Technik können die verschiedenen temperaturabhängigen Eigenschaften und Prozesse an den Barrieren und Wirtsgesteinen (Beispiel: Vermeidung mikrobieller Prozesse vs. Vermeidung einer Illit-Smektit-Reaktion im Tongestein) sowie deren Wechselwirkungen und Aspekte zur Rückholbarkeit/Bergung bewertet werden. Derartige konkrete Forschungsarbeiten zur Ableitung von "Temperaturen" mittels numerischer Analysen stehen aber noch aus. Bisher sind für das Standortauswahlverfahren nur generische Studien [31] vorab festgelegter Auslegungstemperaturen von 100 °C bzw. 150 °C erfolgt.

Diese Forschungsarbeiten würden einerseits die "Vorläufigkeit" der Vorgabe einer "Grenztemperatur" an der Außenfläche von Behältern im StandAG [1] im § 27 (4) würdigen und andererseits der Formulierung im StandAG im Abs. 4 des §27 "Solange ... aufgrund ausstehender Forschungsarbeiten" Rechnung tragen. Auf diese Weise würde kein potentiell sicherer Standort bereits vorab aus dem Standortauswahlverfahren ausgeschlossen [32] und auch der Empfehlung der Kommission "Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe" [33] entsprochen, Wirtsgestein- und Endlagerkonzept-spezifisch Vor- und Nachteile einer "Grenztemperatur" abzuwiegen.

- Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle. Standortauswahlgesetz -StandAG: Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle. Standortauswahlgesetz – StandAG (20.07.2017).
- [2] Röhlig K.-J.: Stellungnahme anlässlich der öffentlichen Anhörung zu dem Entwurf eines Gesetzes zur Fortentwicklung des Gesetzes zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle und anderer Gesetze, Deutscher Bundestag (BT), Berlin. 18(16)526-H (01.03.2017).
- [3] Jentzsch G.: Temperaturverträglichkeit der Gesteine. Neigung zur Ausbildung von Wasserwegsamkeiten, Jena (14.06.2002).
- [4] Meleshyn A., Weyand T., Bracke G., Kull H., Wieczorek K.: Wärmeentwicklung / Gesteinsverträglichkeit, Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe. K-MAT 64 (Mai 2016).
- [5] Entsorgungskommission (ESK): Stellungnahme der ESK Endlagerforschung in Deutschland: Anmerkungen zu Forschungsinhalten und Forschungssteuerung, Bonn (12.05.2016).
- [6] Bräuer V., Dohrmann R., Enste G., Fahland S., Gräsle W., Hammer J., Hertzsch J.-M., Hesser J., Heusermann S., Kaufhold S., Landsmann B., Maßmann J., Mertineit M., Mrugalla S., Schäfers A., Schramm M., Schuster K., Sönnke J., Stadler S., Stührenberg D., Weber J. R., Weitkamp A.: Literaturstudie Wärmeentwicklung-Gesteinsverträglichkeit. Beratung der Endlagerkommission, Hannover. K-MAT 55 (März 2016).
- [7] Jobmann M., Burlaka V., Meleshyn A., Rübel A.: Spezifische Prozessanalysen. Projekt ANSICHT, Peine. TEC-13-2016-B (04.07.2016).
- [8] Jobmann M., Maßmann J., Meleshyn A., Polster M.: Quantifizierung von Kriterien f
 ür Integrit
 ätsnachweise im Tonstein, Peine. TEC-08-2013-AP (15.12.2015).
- [9] Bracke G., Hartwig-Thurat E., Larue J., Meleshyn A., Weyand T.: Untersuchungen zu den "maximalen physikalisch möglichen Temperaturen" gemäß § 27 StandAG im Hinblick auf die Grenztemperatur an der Außenfläche von Abfallbehältern, Bundesamt für kerntechnische Entsorgungssicherheit (BfE), Köln. urn:nbn:de:0221-2019111520402 / BfE-RESFOR-003/19 / GRS-A-3948 (Januar 2019).
- [10] DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC): Gutachten Flächenbedarf für ein Endlager für wärmeentwickelnde, hoch radioaktive Abfälle. (FEHRA), Peine. K-MAT 58 (2016).
- [11] Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB): Programm für eine verantwortungsvolle und sichere Entsorgung bestrahlter Brennelemente und radioaktiver Abfälle. Nationales Entsorgungsprogramm (August 2015).
- [12] Organization for Economic Co-operation and Development Nuclear Energy Agency (OECD-NEA): Features, Events and Processes (FEPs) for Geologic Disposal of Radioactive Waste. An International Database, Paris, France (2000).
- [13] Organization for Economic Co-operation and Development Nuclear Energy Agency (OECD-NEA): NEA International FEP Database. User Notes. Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency (OECD-NEA) (2006).
- [14] Radioactive Waste Management Committee (RWMC): Updating the NEA International FEP List. An Integration Group for the Safety Case (IGSC) Technical Note Technical Note 1: Identification and Review of Recent Project-specific FEP Lists 25 September 2012. NEA/RWM/R(2013)7 (29.01.2014).
- [15] Radioactive Waste Management Committee (RWMC): Updating the NEA International FEP List. An Integration Group for the Safety Case (IGSC) Technical Note Technical Note 2: Proposed Revisions to the NEA International FEP List. NEA/RWM/R(2013)8 (16.6.2014).
- [16] Fischer-Appelt K., Baltes B., Buhmann D., Larue P.-J., Mönig J.: Synthesebericht für die VSG. Bericht zum Arbeitspaket 13. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln (2013).
- [17] Jobmann M., Bebiolka A., Jahn S., Lommerzheim A., Maßmann J., Meleshyn A., Mrugalla S., Reinhold K., Rübel A., Stark L., Ziefle G.: Projekt ANSICHT. Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager im Tongestein in Deutschland. TEC-19-2016-AB (30.03.2017).
- [18] Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): FEP report for the safety assessment SR-Site, Stockholm, Schweden. TR-10-45 (2010).
- [19] Wolf J., Behlau J., Beuth T., Bracke G., Bube C., Buhmann D., Dresbach C., Hammer J., Keller S., Kienzler B., Klinge H., Krone J., Lommerzheim A., Metz V., Mönig J., Mrugalla S., Popp T., Rübel A., Weber J. R.: FEP-Katalog für die VSG. Dokumentation (2012).
- [20] Beuth T., Bracke G., Buhmann D., Dresbach C., Hammer J., Keller S., Krone J., Lommerzheim A., Mönig J., Mrugalla S., Rübel A., Wolf J.: Szenarienentwicklung für die Endlagervariante AB1. Kammerlagerung der vernachlässigbar

wärmeentwickelnden Abfälle im Südwestflügel und Streckenlagerung der wärmeentwickelnden Abfälle im Nordostflügel des Salzstockes Gorleben, Köln (2012).

- [21] Jobmann M., Becker D.-A., Hammer J., Jahn S., Lommerzheim A., Müller-Hoeppe N., Noseck U., Krone J., Weber J. R., Weitkamp A., Wolf J.: Projekt CHRISTA: Machbarkeitsuntersuchung zur Entwicklung einer Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland, Peine. TEC-20-2016-AB (24.10.2016).
- [22] Organization for Economic Co-operation and Development Nuclear Energy Agency (OECD-NEA): Methods for Safety Assessment of Geological Disposal Facilities for Radioactive Waste. Outcomes of the NEA MeSA Initiative, Issy-les-Moulineaux (2012).
- [23] Kock I., Eickemeier R., Frieling G., Heusermann S., Knauth M., Minkley W., Navarro M., Nipp H.-K., Vogel P.: Integritätsanalyse der geologischen Barriere. Bericht zum Arbeitspaket 9.1, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, Köln (2012).
- [24] Bracke G., Fischer-Appelt K.: Methodological approach to a safety analysis of radioactive waste disposal in rock salt. An example. Progress in Nuclear Energy 84, 79–88 (2015).
- [25] Alfarra A., Bertrams N., Bollingerfehr W., Eickemeier R., Flügge J., Frenzel B., Maßmann J., Mayer K.-M., Mönig J., Mrugalla S., Müller-Hoeppe N., Reinhold K., Rübel A., Schubarth-Engelschall N., Simo E., Thiedau J., Thiemeyer T., Weber J. R., Wolf J.: Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in einer Tongesteinsformation geringerer Mächtigkeit bei einer höheren Auslegungstemperatur. RESUS. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (2020).
- [26] Bertrams N., Bollingerfehr W., Eickemeier R., Fahland S., Flügge J., Frenzel B., Hammer J., Kindlein J., Liu W., Maßmann J., Mayer K.-M., Mönig J., Mrugalla S., Müller-Hoeppe N., Reinhold K., Rübel A., Schubarth-Engelschall N., Simo E. K., Thiedau J., Thiemeyer T., Weber J. R., Wolf J.: Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in flach lagernden Salzformationen bei einer höheren Auslegungstemperatur. RESUS. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (2020).
- [27] Freudenberg W., Schwerd K.: Erläuterungen zur Geologischen Karte von Bayern 1:500000. Kapitel 7: Tektonik, Bayrisches Geologisches Landesamt, München. Kapitel 7 (1996).
- [28] Knutsson S.: On the thermal conductivity and thermal diffusivity of highly compacted bentonite. TR 83-72 (1983).
- [29] Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Buffer, backfill and closure process report for the safety assessment SR-Site, Stockholm. TR-10-47 (November 2010).
- [30] Mayer K.-M., Beuth T., Bracke G.: Szenarienentwicklung für verschiedene Wirtsgesteine und Endlagerkonzepte, Köln (August 2019).
- [31] Mönig J., Bertrams N., Bollingerfehr W., Fahland S., Frenzel B., Maßmann J., Müller-Hoeppe N., Reinhold K., Rübel A., Schubarth-Engelschall N., Simo E. K., Thiedau J., Weber J. R., Wolf J.: RESUS - Empfehlungen zur sicherheitsgerichteten Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien des StandAG. Synthesebericht, Köln (2020).
- [32] Watzel R.: Stellungnahme zur öffentlichen Anhörung des Umweltausschusses am 08.03.2017 zur Fortentwicklung des StandAG, Deutscher Bundestag (BT), Berlin. 18(16)526-G (01.03.2017).
- [33] Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe: Abschlussbericht. Verantwortung für die Zukunft Ein faires und transparentes Verfahren für die Auswahl eines nationalen Endlagerstandortes, Berlin. 268 (30.08.2016).

Modelling gas migration in tight barriers. Activities of the 'German Cluster' within the European Joint Programme on Radioactive Waste Management – Work package GAS

M. Pitz^{e,1}, N. Grunwald¹, A. Hassanzadegan¹, O. Kolditz^{1,1}, J. Maßmann^e, C. Müller¹, T. Nagel¹, E. Simo^{1,1}, W. Wang¹, M. Wengler¹, G. Ziefle^e

^a Federal Institute for Geosciences and Natural Resources (BGR), Hanover, Germany
 ^b Federal Company for Radioactive Waste Disposal (BGE mbH), Peine, Germany
 ^c Helmholtz Centre for Environmental Research (UFZ), Leipzig, Germany
 ^d Technische Universität Bergakademie Freiberg (TUBAF), Freiberg, Germany
 ^e Technische Universität Dresden (TUDD), Dresden, Germany

Key words: geotechnical barrier, two-phase-flow, numerical modelling, gas migration

1. Introduction: Aims of the European Joint Programme (EJP) EURAD Project

The challenge of a safe radioactive waste disposal concerns many nations around the world and in the Euro-pean Union, member states reached the general consensus that knowledge transfer and collaboration on a management and a scientific level are of high importance. To tackle this challenge, different work packages (WPs) have been defined in EURAD which fall in the following categories: Research and development, strategic studies, knowledge management, and interaction with civil society. To improve the understanding of radioactive waste repository systems, the EJP-EURAD brings together more than 50 institutions involved in radioactive waste disposal: Amongst the participants, there are waste management organisations, technical support organisations and research entities, many of which represent the actors nationally mandated with implementation, regulation and research of the national radioactive waste management programmes. Bringing together 'players' from the European nations from all three categories above allows for an important exchange: The 'state-of-knowledge' of radioactive waste disposal is formulated, scientific insights are shared and a general knowledge transfer between nations is facilitated by frequently organised workshops including a PhD-programme featuring various teaching materials.

2. Mechanistic understanding of gas transport in clay materials (WP GAS)

Due to the corrosion of deposited materials (including metallic structural reinforcements) and other pro-cesses such as radiolysis of the formation water, hydrogen gas is released and gas pressure can build up in the repository. Gas could subsequently migrate through geotechnical and geological barriers. Micro-cracks and fractures induced by these processes can contribute to a long-term change of the mechanical and hydraulic properties with potentially unfavourable impacts on the barrier integrity. Therefore, a thorough understanding of gas transport mechanisms is essential for the safety case of nuclear waste repositories. To improve the understanding of gas transport mechanisms, laboratory experimental work is carried out as well as numerical modelling, where the experiments serve both as motivation and validation for the implementation of new numerical models.

3. Code implementation and application concept

In addition to the international cooperative work on the European level, the BGR, BGE, TUBAF and the UFZ form the 'German Cluster' to coordinate their research using the finite element code OpenGeoSys-6 (OGS-6) [1]. Experimental input from other institutions involved in WP GAS will be used to validate and improve gas transport models in OGS. In close collaboration, UFZ/TUBAF act as the code developer; BGR and BGE act as the code users (Fig. 1).



Figure 1: Workflow of model implementation with OGS-6

4. Modelling activities

The code implementation concept is applied here for the development of various permeability models: An increase of gas pressures driven by processes discussed in section 2 could lead to dilatancy and/or fracturing and consequently to a change in rock permeability. To assess and simulate the impact of this effect on gas propagation, permeability models were developed and validated in a previous study [3]. The basic approaches therein comprise a) a deformation dependent, b) a gas pressure dependent and c) a shear stress dependent permeability model with some of the results illustrated in Fig. 2. The 'German Cluster' builds on these models: First, the existing models are implemented in OGS-6 according to the workflow illustrated in Fig. 1. As a benchmark for verification and testing, the experimental setup in Fig. 2 is used and the model implementation is documented in the OGS-6 repository (https://gitlab.opengeosys.org/ogs/ogs). Next, the models will be tested against the ongoing WP GAS experiments and, using the experimental input, are continuously developed. Future work will focus on new permeability models and possibly include creation and propagation of micro-fractures as well as take into account micro-heterogeneities. The implemented models will be subsequently used to simulate the gas transport phenomena occurring in repositories for radioactive waste in clay formations. The modelling of a selected in situ experiment assessing gas transport in clay will be carried out by the 'German Cluster' in the course of WP GAS for this purpose.



Figure 2: Left: Experiment set up; p_1 and p_2 are the gas injection pressure and gas back pressure. p_0 represents atmospheric pressure and q_0 is the gas flux measured at the outlet. Fax represents the axial stress which is set constant in this experiment. Right: Experimental results (in blue, green and red) and calculated gas flow rates [2], using two permeability modification approaches (triangle and square symbols) [3].

Acknowledgements

The EJP-EURAD project is supported by the European Grant Agreement No. 847593.

- Naumov, D., Bilke, L., Fischer, T., Huang, Y., Lehmann, C., Miao, X.-Y., Nagel, T., 2018. Appendix a: OpenGeoSys-6. In O. Kolditz, T. Nagel, H. Shao, W. Wang, & S. Bauer (Eds.), Thermo-hydro-mechanical-chemical processes in fractured porous media: Modelling and Benchmarking (pp. 271-277). Springer International Publishing.
- [2] Popp, T., Wiedemann, M., Böhnel, H., Minkley, W., 2007. Untersuchungen zur Barriereintegrität im Hinblick auf das Ein-Endlager-Konzept. Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig, Germany.
- [3] Xu, W.J., Shao, H., Hesser, J., Kolditz, O., 2014. Numerical modelling of moisture controlled laboratory swelling/shrinkage experiments on argillaceous rocks. Geological Society, London, Special Publications 400, 359 - 366 (http://dx.doi.org/10.1144/SP400.29).

Towards THM modelling of the FE experiment at Mont Terri within the DECOVALEX project

Sonja Kaiser^a, Wenqing Wang^b, Merle Bjorge^c, Wolfram Rühaak^c, Thomas Nagel^a

^aGeotechnical Institute, Technische Universität Bergakademie Freiberg – TUBAF, Freiberg, Germany ^bHelmholtz Centre for Environmental Research – UFZ, Leipzig, Germany ^cFederal company for radioactive waste disposal – BGE, Peine, Germany

Key words: Decovalex, THM modelling, FE experiment, Mont Terri

The Decovalex-2023 project is the recent part of the collaborative research and model validation initiative DECOVALEX, a large international project, that was initiated back in 1992 to advance the understanding and modelling of coupled thermo-hydro-mechanical-chemical (THMC) processes in geological systems. Being able to predict the material behaviour when considering the effects of these coupled processes is very important for the performance and safety assessment of geologic disposal systems for radioactive waste and spent nuclear fuel, as well as for a variety of other underground engineering activities. Therefore, in DECOVALEX, the associated research and modelling teams work together cooperatively across nuclear waste management organizations including implementers and regulators.

In Task C of Decovalex-2023, the full-scale emplacement (FE) experiment (Fig. 1) at the Mont Terri underground research laboratory is chosen as the field experiment to be modelled. This experiment is unique in its size, monitoring scheme and practical relevance. A new 55 m long tunnel was drilled into the Opalinus Clay, that was supported by shotcrete and rock bolts, where the horizontal emplacement of nuclear waste canisters was simulated by placing three canister sized heaters on bentonite blocks. A backfill of granular bentonite and a concrete plug were installed in addition to an incredible large number of measurement instruments. Then, the heaters were turned on and are operational until today as well as the massive monitoring of various parameters that delivers a huge amount of data points per day.



Figure 1: Layout of the FE tunnel with the FE experiment in Mont Terri, [1].

To understand and reproduce these measurement data, coupled THM process simulators are used to model the processes in the Opalinus Clay, the granular bentonite and the bentonite blocks. The main focus lies on the pore pressure development in the Opalinus Clay, to investigate how it is affected by the heating. Engineering factors like the shotcrete of the support or the shape of the tunnel and damage due to the tunnel construction or due to the thermal effects of heating will also be studied in the Opalinus Clay and the bentonite. In the course of doing this, the existing coupled THM models will be validated and developed further. Finally, this may lead to a further development of the emplacement concepts in clay rock. The first part, the preparation phase, of Task C in Decovalex-2023, considers benchmarking the models against tightly defined 2D test cases. This Step0 study, that was designed for a maximum comparability between the teams' models, is an idealized representation of the FE Experiment, but includes T, H and M processes already as well as several steps of increasing complexity. Here, we present first results from this code benchmarking based on simulations with OpenGeoSys. We apply the theory of non-isothermal Richards flow with mechanics to solve the coupled thermo-hydro-mechanical problem under unsaturated conditions. The next steps will involve a progressive modelling of the actual in situ experiment.

Acknowledgements Funding was provided by the Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE), the German federal company for radioactive waste disposal.

We are also very grateful to the OpenGeoSys developer team for their enthusiastic, continuous work on further developing and improving the OGS platform for the scientific community.

DECOVALEX is an international research project comprising participants from industry, government and academia, focusing on development of understanding, models and codes in complex coupled problems in sub-surface geological and engineering applications.

DECOVALEX-2023 is the current phase of the project. The authors appreciate and thank the DECO-VALEX-2023 Funding Organisations for their financial and technical support of the work described in this paper.

The statements made in the paper are, however, solely those of the authors and do not necessarily reflect those of the Funding Organisations.

Open Access This article is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), which permits unrestricted use, distribution and reproduction in any medium, provided you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to the Creative Commons license and indicate if changes were made. The figure from [1] was not modified.

Müller, Herwig R.; Garitte, Benoit; Vogt, Tobias; Köhler, Sven; Sakaki, Toshihiro; Weber, Hanspeter; Spillmann, Thomas; Hertrich, Marian; Becker, Jens K.; Giroud, Niels; Cloet, Veerle; Diomidis, Nikitas; Vietor, Tim: Implementation of the full-scale emplacement (FE) experiment at the Mont Terri rock laboratory, Swiss Journal of Geosciences, 110, 287–306, doi:10.1007/s00015-016-0251-2, 2017.

Coupled modelling of moisture and heat transfer in partially saturated clay

Hung Pham^a, Wolfram Rühaak^b, Maximilian Eckhardt^a, Ingo Sass^a

^aInstitute of Applied Geosciences, Technische Universität Darmstadt ^bBundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE)

Key words: Finite element model, coupled numerical model, moisture and heat transfer, unsaturated

The moisture and heat transfer process in clay layers around hot canisters is can be of relevance for a nuclear waste repository. Moisture, which includes both vapor and liquid water, is transferred due to the temperature gradient and related density differences but also by matric suction or the water content gradient. Because of these processes, additional heat flux occurs. This is process is manifold coupled and nonlinear process.

In this study, a fully coupled finite element code based on the moisture and heat transfer theory of Philip and de Vries is developed [1-3]. However, instead of choosing the water content as an unknown variable, the matric suction is used to avoid the discontinuity of the water content field. Both, temperature and matric suction, are directly coupled by solving in the same matrix system. The code is validated with single process problems. The temperature gradient is set to zero and Richard's equation is used to benchmark the code. For the thermal transfer process, the matric suction gradient is ignored. Long-term data from tests with hot power cables are used to check the finite element code. Preliminary results will be shown and discussed.

- Philip and d. Vries, Simultaneous transfer of heat and moisture in porous media. Eos, Transactions American Geophysical Union, 1958. 39(5): p. 909-916.
- [2] De Vries, D.A., The theory of heat and moisture transfer in porous media revisited. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1987. 30(7): p. 1343-1350.
- [3] Philip and d. Vries, Moisture movement in porous materials under temperature gradients. Eos, Transactions American Geophysical Union, 1957. 38(2): p. 222-232.

Anforderungen an Behälter für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein

H. Völzke^a, Ch. Herold^a, D. Wolff^a, T. Orellana Pérez^a, W. Bollingerfehr^b, A. Wunderlich^b, S. Prignitz^c

^a Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin ^b BGE TECHNOLOGY GmbH, Peine ^c Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE), Peine

Key words: Endlager, Behälter, Sicherheitsanforderungen, radioaktive Abfälle

1 Einführung

Bei der Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente) in Deutschland werden auf Grundlage des Standortauswahlgesetzes von 2017 [1] die drei potenziellen Wirtsgesteine Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein in Betracht gezogen. Die Auswahl eines konkreten Endlagerstandortes steht dabei in engem Zusammenhang mit den für die jeweiligen Wirtsgesteine geeignet erscheinender Endlagersystemen. Zentraler Bestandteil dieser Endlagersysteme sind die Endlagerbehälter, deren Gestaltung und Auslegung maßgeblich die Randbedingungen für die Transport- und Einlagerungstechnik vorgibt und zudem die Nachweise zur Betriebs- und Langzeitsicherheit entscheidend prägt. Daher ist es für die Behälterentwicklung erforderlich, die an Endlagerbehälter zu stellenden Anforderungen systematisch herzuleiten. Auf dieser Grundlage können anforderungsgerechte Endlagerbehälter zielgerichtet für die jeweils zu untersuchenden Endlagerstandorte in unterschiedlichen Wirtsgesteinen entwickelt werden.

Dieser Beitrag fasst die wesentlichen Ergebnisse des von BAM und BGE TECHNOLOGY GmbH im Zeitraum 2017 bis 2020 bearbeiteten und vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) geförderten Forschungsvorhabens KoBrA zusammen, die in einem Abschlussbericht [2] und vier zugehörigen Teilberichten [3], [4], [5], [6] umfassend dokumentiert sind. Entsprechende Passagen sind dabei überwiegend wortgetreu aus dem Abschlussbericht zum Vh KoBrA [2] übernommen worden

Ausgehend von einer umfangreichen internationalen Recherche zu bestehenden Behälterkonzepten und anforderungen im Arbeitspaket 1 [3] wurden im Arbeitspaket 2 die bisherigen behälterrelevanten Randbedingungen und Beanspruchungsgrößen für Endlagerbehälter in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein am Beispiel Deutschland analysiert und ausgewertet [4]. Kernpunkt des Vorhabens war die systematische Herleitung und Zusammenstellung der Anforderungen an Endlagerbehälter für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein im Arbeitspaket 3 [5]. Hierfür wurde ein sog. Top-Down-Ansatz entwickelt, der eine schrittweise Vorgehensweise zur Herleitung generischer Behälterkonzepte beinhaltet unter Berücksichtigung der möglichen Einwirkungen und Anforderungen, über spezifische Betrachtungen für konkrete Wirtgesteinen bis hin zu Herleitung der standortspezifischen, konkreten Behälterdesigns unter Berücksichtigung quantifizierter Anforderungen und Einwirkungen. Im Arbeitspaket 4 schließlich wurden Betrachtungen angestellt, welche Behälterkonzepte möglich und geeignet erscheinen und inwieweit bereits entwickelte nationale und internationale Behälterkonzepte einschließlich des deutschen POLLUX® Behälterkonzeptes und der bereits existierenden Transport- und Lagerbehälter für die Zwischenlagerung möglicherweise geeignet sind, die hergeleiteten Anforderungen zu erfüllen bzw. welche besonderen Schwierigkeiten und Herausforderungen erkennbar sind [6].

2 Internationale Behälterkonzepte zur Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (nach [2], [3])

Im Rahmen einer umfassenden Literaturrecherche ist eine umfangreiche Dokumentensammlung zu Behälterkonzepten und -anforderungen erstellt und ausgewertet worden. Die Entwicklung von Behälterkonzepten in den elf bislang am meisten fortgeschrittenen Endlagerprogrammen wurde vor dem Hintergrund der jeweils an die Behälter gestellten Anforderungen detailliert ausgewertet und relevante Informationen zusammengetragen. Diese Endlagerprogramme umfassen alle in Deutschland betrachteten potenziellen Wirtsgesteine – Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein – und ergeben gleichzeitig eine Übersicht über verschiedene Stadien der Endlagerprogramme von generischen Forschungsarbeiten im

Rahmen der Standortauswahl (z. B. Tschechien, Kanada, Schweiz) bis zum Beginn des Genehmigungsverfahrens für den Endlagerbetrieb (Finnland).

Die international zugrunde gelegten Behälteranforderungen in den betrachteten Endlagerprogrammen lassen sich in schutzzielorientierte und betriebsorientierte Anforderungen unterteilen. Erstere sind aufgrund der international weitestgehend abgeglichenen Schutzzieldefinitionen in den ieweiligen Endlagerprogrammen sehr ähnlich oder sogar gleich. Anforderungen hinsichtlich Kritikalitätsausschluss oder der zum Schutz der weiteren Barrieren hinreichenden Abschirmung der von den Radionukliden ausgehenden ionisierenden Strahlung sind international vergleichbar geregelt. Zum Schutz des Multibarrierensystems festgelegte Temperaturgrenzwerte an der Gebindeoberfläche sind dagegen wirtsgesteins- bzw. endlagerkonzeptabhängig definiert, wobei die Verwendung tonbasierter geotechnischer oder geologischer Barrieren in fast allen Fällen zu einer Begrenzung auf maximal 100 °C führt. In Deutschland gilt vorbehaltlich neuer Forschungsergebnisse eine wirtsgesteinsunabhängige Grenztemperatur von 100 °C als vorläufige Sicherheitsanforderung an Behälterkonzepte [1].

Betriebsorientierte Anforderungen ergeben sich in allen internationalen Endlagerprogrammen einerseits aus der Handhabung der Endlagergebinde, woraus sich maximal zulässige Grenzwerte für Temperaturen und Ortsdosisleistung herleiten bzw. aus der Notwendigkeit technischer Hilfsmittel, wie z. B. Transferbehälter. Andererseits resultieren Anforderungen aus Fertigung, Beladung, Transport und Einlagerung der Behälter und der dazugehörigen Qualitätssicherung. Zu diesen Anforderungen zählen z. B. die vollständige Dokumentation und Identifizierbarkeit der Gebinde, maximale Gebindemassen und -maße sowie verwendete Materialien, Komponenten zur Handhabung (z. B. Tragzapfen, Hebepilze) und die Verfügbarkeit von Fertigungstechnologien (z.B. Schweißtechnologien).

Die Mehrzahl der international betrachteten Behälterkonzepte besteht aus zwar nicht ausreichend für Handhabung und Transport abgeschirmten, aber dennoch mechanisch robusten Behältern. Sie bilden zusammen mit der Abfallform das Endlagergebinde, sind aber für die Handhabung während Transport und Einlagerung auf Transferbehälter angewiesen. Ein Beispiel hierfür ist das schwedisch-finnische KBS-3-Konzept, das auch Vorbild für andere Behälterkonzepte ist.

Behälterkonzepte im Kristallingestein sind durchweg auf lange Standzeiten bis hin zum gesamten landesspezifischen Nachweiszeitraum ausgelegt. Der sichere Einschluss des radioaktiven Inventars muss in einem korrosiven Umfeld mit hohen Gebirgsdrücken konzeptabhängig nachgewiesen werden, in den betrachteten internationalen Konzepten über bis zu 100.000 Jahre. Ein Nachweiszeitraum von 1 Million Jahren, wie er in Deutschland gefordert wird [1], ist weltweit bisher noch nicht betrachtet worden. Die Behälter bestehen meist aus einer eisenbasierten festen inneren Hülle und einer korrosionsresistenten äußeren Hülle oder Beschichtung. Als geotechnische Barriere wird ein Buffer aus Bentonit verwendet. Für Behälterkonzepte im Tonstein werden entsprechend der Barrierewirkung des Wirtsgesteines geringere Standzeiten von einigen tausend Jahren gefordert. Bislang entwickelte Behälterkonzepte bestehen aus Stahl, wobei eine begrenzte Korrosion in Kauf genommen wird. Die bislang nur in Deutschland betrachteten Behälterkonzepte für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle im Steinsalz – selbstabschirmender Doppelhüllenbehälter und unabgeschirmte Kokille – sind entsprechend der dominierenden Barrierefunktion des Wirtsgesteines nur für Standzeiten bis ca. 500 Jahre ausgelegt worden.

3 Behälterspezifische Randbedingungen und Einwirkungen (nach [2], [4])

In einem Endlager für hochradioaktive Abfälle (Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente) ist der Endlagerbehälter einer Vielzahl von mechanischen, thermischen, radiologischen, chemischen und biologischen Einwirkungen ausgesetzt, die kurz-, mittel- und langfristig auf ihn einwirken. Je nach Sicherheits- und Nachweiskonzept muss der Behälter ggf. in Verbindung mit weiteren geotechnischen Barrieren (z. B. Buffer) unter diesen Einwirkungen sicherheitstechnische Funktionen bis zu einem gewissen Zeitpunkt, längstens bis zum Ende des Nachweiszeitraumes von 1 Million Jahren, übernehmen und dementsprechend ausgelegt sein. Dabei ergeben sich die Standort- bzw. konzeptspezifischen Einwirkungen bzw. Beanspruchungsgrößen aus den Randbedingungen des Endlagerstandortes und Endlagerkonzeptes. Randbedingungen sind u.a. die Standortgeologie, die Endlagerteufe, die Art und Weise von Transport und Einlagerung, Rückholungskonzepte oder zu betrachtende Betriebsstörungen und Störfallszenarien.

Aus den Randbedingungen ergeben sich wiederum einerseits unveränderliche Einwirkungen, z. B. aus der am Standort vorliegenden Geologie des Wirtsgesteins, an die das Behälterkonzept angepasst werden muss. Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021 Andere Einwirkungen, z. B. die mechanischen Einwirkungen aus der Einlagerungstechnik, sind dagegen variabel und können im Rahmen der Behälter- und Endlagerauslegung sicherheitsgerichtet angepasst werden. Es gibt jedoch auch Randbedingungen und Einwirkungen, die durch den Behälter selbst beeinflusst werden können, wie z. B. das geochemische Milieu in Verbindung mit den gewählten Behältermaterialien. Damit wird deutlich, dass vielfältige Aspekte bei der Erstellung des Behälterkonzeptes und der Behälterauslegung zu berücksichtigen sind.

Im Rahmen des Vorhabens KoBrA [2], [4] wurden zunächst die wirtsgesteinsübergreifenden behälterrelevanten Randbedingungen und Einwirkungen identifiziert. Dazu zählen die aus den zu entsorgenden radioaktiven Abfällen unmittelbar resultierenden geometrischen, thermischen und radiologischen Randbedingungen bzw. Einwirkungen. Dazu kommen durch die Geologie bedingte thermische und mechanische Randbedingungen und Einwirkungen wie Gebirgstemperatur und -drücke. Im weiteren Verlauf wurden wirtsgesteinsspezifische Einflussfaktoren unter Berücksichtigung der bisher für Deutschland entwickelten Endlagerkonzepte ausgewertet, wobei auch behälterspezifische Einwirkungen aus Betriebsstörungen und Störfällen berücksichtigt wurden. Einzelheiten dazu finden sich in [2] und [4]. Ergänzend wurden in einzelnen Fällen Betrachtungen hinsichtlich einer Rückholbarkeit der Endlagergebinde angestellt und entsprechende technische Konzepte entwickelt bzw. betrachtet. Hinsichtlich Bergbarkeit wurden bislang hingegen weder national noch international spezifische Betrachtungen angestellt.

4 Herleitung der Anforderungen an Endlagerbehälter für hochradioaktive Abfälle (nach [2], [5])

Zur systematischen Herleitung von Anforderungen an Endlagerbehälter und der zu ihrer Erfüllung notwendiger Funktionen wurde im Vorhaben KoBrA [2], [5] die Methodik eines Top-Down-Ansatzes entwickelt, siehe Abbildung 1.



Abbildung 1: Top-Down-Ansatz zur Entwicklung anforderungsgerechter Behälter zur Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (aus [2])

Demnach werden bei dem entwickelten Top-Down-Ansatz in einer ersten Stufe zunächst die aktuell gültigen rechtlichen Regelungen und Rahmenbedingungen, die für die Konzeption und den Nachweis von Endlagerbehältern relevant sind, ermittelt. Hierzu zählen vorrangig das Atomgesetz [7], das Strahlenschutzgesetz [8] mit den zugehörigen Verordnungen, das Standortauswahlgesetz [1], die Sicherheitsanforderungen des BMU an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle vom 30. September 2010 [9], die Endlagersicherheitsanforderungsverordnung - EndlSiAnfV vom 06. Oktober 2020 [10] sowie Leitlinien und Empfehlungen der Entsorgungskommission (ESK), z. B. [11].

Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021

Gleichzeitig resultieren aus den regulatorischen Anforderungen verschiedene Nutzungsphasen der Behälter. Hierzu zählen <u>Einlagerungsphase</u> (Bereitstellung des Behälters zur Einlagerung bis Abschluss der Einlagerung des Behälters), <u>Rückholbarkeitsphase</u> (Abschluss der Einlagerung des Behälters bis Beginn der Stilllegung des Endlagers), <u>Bergbarkeitsphase</u> (Beginn der Stilllegung des Endlagers bis 500 Jahre nach Verschluss des Endlagers) sowie die <u>spätere Nachbetriebsphase</u> (500 Jahre nach Verschluss des Endlagers bis zum Ende des Nachweiszeitraums). Im Ergebnis resultiert eine generische Übersicht der in Deutschland an Endlagerbehälter zu stellenden Anforderungen, auf deren Grundlage die Herleitung der notwendigen generischen Sicherheitsfunktionen, über die Endlagerbehälter zur Erfüllung der Anforderungen in Abhängigkeit von den Nutzungsphasen verfügen müssen, siehe Tabelle 1 aus [5]. Parallel werden auf generischer Ebene die zu erwartenden Einwirkungen auf die Endlagerbehälter unter Berücksichtigung des jeweiligen Wirtsgesteins, des Einlagerungsbetriebes sowie der o. g. Nutzungsphasen unter besonderer Berücksichtigung der in Deutschland geforderten Rückhol- und Bergungsoptionen beschrieben.

Auf Grundlage der ermittelten grundlegenden Anforderungen, generischen Behälterfunktionen und Einwirkungen können schließlich generische Behälterkonzepte entwickelt werden, die über die notwendigen Funktionen bei den relevanten, phasenabhängigen Einwirkungen verfügen. Kennzeichnend für diese erste Stufe des Top-Down-Ansatzes ist, dass quantitative Angaben nur eingeschränkt verfügbar sind.

	Nutzungsphase				
Grundlegende Behälter-Anforderung	Einlagerung	Rückholbarkeit	Bergbarkeit	später Nachbetrieb	
Einschluss des radioaktiven Inventars	Uneingeschränkt zu gewährleisten			Abhängig vom Sicherheits- und Nachweiskonzept	
Abschirmung	Hinreichend zu gewährleisten Schutz des Personals, der Bevölkerung und der Biosphäre; ggf. im Zusammenwirken mit Transferbehälter				
Strahlung	Hinreichend zu gewährleisten Vermeidung von sicherheitsrelevanten radiolytischen bzw. radiolytisch begünstigten Schädigungen der Barrieren				
Kritikalitätsausschluss	Uneingeschränkt zu gewährleisten für die reaktivste Anordnung des Kernbrennstoffs				
Tomportur	Hinreichend zu gewährleisten Gefahrlose Handhabung ggf. im Zusammenwirken mit Transferbehälter				
beschränkung	Hinreichend zu gewährleisten Vermeidung der sicherheitsrelevanten thermischen Schädigung der Barrieren, des Wirtsgesteins und des Behälterinventars				
Begrenzung der Korrosion und Gasproduktion		Hinreichend zu gewährleisten Vermeidung der Schädigung der Barrieren durch hohe Gasdrücke und der Ausbildung sicherheitsgefährdender Gastransportpfade			
Handhabbarkeit	Hinreichend zu gewährleisten				

Tabelle 1: Zeitliche Abhängigkeit der grundlegenden Behälteranforderungen (aus [2])

Im nächsten Schritt wurde im Vorhaben KoBrA wirtsgesteinsspezifische Übersichten der an die Endlagerbehälter zu stellenden Anforderungen erstellt, auf deren Grundlage die durch die Endlagerbehälter zu erfüllenden Sicherheitsfunktionen quantifiziert werden. Um die Quantifizierung der Sicherheitsfunktionen vornehmen zu können, wurden auch die für die Endlagerbehälter relevanten Einwirkungen quantifiziert, soweit das derzeit möglich ist. Dabei wurden quantifizierte Einwirkungen, die der Auslegung bzw. Erprobung bereits entwickelter Behälterkonzepte für die Wirtsgesteine Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein zugrunde gelegt wurden, berücksichtigt.

In der zweiten Stufe des Top-Down-Ansatzes werden generische Endlagersysteme sowie zugehörige Sicherheits- und Nachweiskonzepte für die verschiedenen Wirtsgesteine einbezogen. Daraus resultieren spezifische Anforderungen, Einwirkungen und Behälterfunktionen mit deutlich konkreteren quantitativen Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021 Vorgaben, mit denen aus den generischen Behälterkonzepten konkrete Behälterkonzepte für die einzelnen Wirtsgesteine entwickelt werden können. Auf dieser Stufe lassen sich damit unterschiedliche Wirtsgesteinund Standortoptionen in Verbindung mit dafür geeigneten Endlager- und Behälterkonzepten vergleichen.

In der dritten und letzten Stufe des Top-Down-Ansatzes werden auf Grundlage des gewählten Endlagerstandortes in Verbindung mit dem zugehörigen Sicherheits- und Nachweiskonzept quantifizierte Einwirkungen und Behälterfunktionen zur Erfüllung der quantifizierten Behälteranforderungen hergeleitet. Auf deren Grundlage kann schließlich ein konkretes, wirtsgesteinsspezifisches Behälterdesign für den konkreten Endlagerstandort entwickelt werden.

Im Rahmen des standortspezifischen Genehmigungsverfahrens ist abschließend der behälterspezifische Sicherheitsnachweis für das konkrete Behälterdesign zu führen, mit dem der Nachweis des Erhalts der relevanten Behälterfunktionen und der Erfüllung aller Anforderungen bei den relevanten Einwirkungen über den gesamten Nachweiszeitraum zu erbringen ist.

5 Betrachtungen zu möglichen Behälterkonzepten (nach [2], [6])

Grundlage für die Methodik zur Untersuchung existierender Behälterkonzepte im Hinblick auf eine mögliche Übertragbarkeit auf zukünftige Endlagerkonzepte in Deutschland ist der im Vorhaben entwickelte Top-Down-Ansatz zur Herleitung anforderungsgerechter Behälterkonzepte (Abbildung 1). Demnach werden aus den Anforderungen an die Endlagergebinde Behälterfunktionen abgeleitet, auf deren Grundlage ein Behälterkonzept entwickelt wird. Unter Berücksichtigung der Einwirkungen auf die Endlagergebinde dienen diese Behälterfunktionen der Erfüllung der Anforderungen. Folgerichtig ist zuerst anhand einer vergleichenden Betrachtung dieser Anforderungen und Einwirkungen zu prüfen, inwieweit eine Übertragbarkeit bestehender Behälterkonzepte auf andere Endlagerkonzepte möglich erscheint. Die daraus entwickelte Methodik ist in Abbildung 2 dargestellt. Die Zusammenhänge auf beiden Seiten der Graphik (existierende Behälterkonzepte auf der linken Seite, daraus hergeleitete übertragbare Behälterkonzepte für die drei potenziellen Wirtsgesteine auf der rechten Seite) entsprechen unmittelbar dem in Abbildung 1 dargestellten Top-Down-Ansatz.

5.1 Übertragbarkeit bestehender Behälterkonzepte

Wesentlich für die hier vorgenommene Untersuchung ist demnach, ob einerseits die für die betrachteten Behälterkonzepte berücksichtigten Einwirkungen die in einem Endlager in Deutschland zu erwartenden Einwirkungen abdecken; andererseits ist zu klären, ob die von den betrachteten Endlagerbehälterkonzepten zu erfüllenden Anforderungen die für Deutschland hergeleiteten Anforderungen mindestens abdecken. Bei festgestellten Differenzen ist eine vergleichende Betrachtung der Behälterfunktionen erforderlich, um eine Aussage für eine mögliche Übertragbarkeit treffen zu können.

Die im Vorhaben KoBrA ausgewählten und betrachteten Behälterkonzepte beinhalten die Behälterkonzepte aus Schweden bzw. Finnland, Kanada und der Tschechischen Republik für kristalline Wirtsgesteine, weiterhin die Behälterkonzepte aus Belgien, Frankreich und der Schweiz für Tonstein sowie die Behälterkonzepte aus Deutschland für Steinsalz. Zusätzlich wurden die in Deutschland verwendeten Transport- und Lagerbehälter für hochradioaktive Abfälle als bereits vorhandene Behältergruppe in die Auswahl aufgenommen, da in einer Machbarkeitsstudie für die kerntechnische Industrie erste Konzepte zum Transport und zur Einlagerung in ein Endlagerbergwerk im Steinsalz erarbeitet worden sind [12]. Eine Übersicht über die betrachteten Behälterkonzepte findet sich in Tabelle 2.



Abbildung 2: Methodik zur Untersuchung existierender Behälterkonzepte hinsichtlich der Übertragbarkeit auf Endlagerkonzepte in Deutschland (aus [2])

Die Behälterkonzepte für das amerikanische Yucca-Mountain-Projekt wurden aufgrund der fundamental verschiedenen Randbedingungen (Lagerung in unverfüllten Strecken in ungesättigtem Tuffstein) nicht mit in die Betrachtungen einbezogen. Lediglich die Anforderungen an diese Behälter wurden aus Gründen der Vollständigkeit mit aufgeführt. Gleichermaßen wird auf eine Einbeziehung der generischen Behälterkonzepte für Großbritannien verzichtet, da die Behälterkonzepte für Kristallingestein lediglich Adaptationen der schwedisch-finnischen KBS-3-Behälter sind und die Behälterkonzepte für Tonstein und Steinsalz Adaptationen der Schweizer Referenzbehälter. Aus dem gleichen Grund wurde auch der koreanische KDC-1-Behälter als maßstäbliche Adaptation des schwedisch-finnischen Behälters nicht gesondert betrachtet.

Die Abschätzung der zu erwartenden Einwirkungen auf die Endlagerbehälter in den jeweiligen Endlagerkonzepten und Wirtsgesteinen hat deutlich gemacht, dass es noch erheblichen Forschungsbedarf zur Charakterisierung möglicher Wirtsgesteinsformationen und damit zur Bestimmung der Einwirkungen auf die Endlagerbehälter gibt. Die Erweiterung des diesbezüglichen Kenntnisstandes kann daher für alle drei potenziellen Wirtsgesteine beispielsweise durch Untersuchungen in Forschungsbergwerken sowie durch fortlaufende Erkundungsarbeiten im Rahmen des Standortauswahlverfahrens erreicht werden.

Weiterhin ist bei der Betrachtung der verschiedenen Behälterkonzepte deutlich geworden, dass, von wenigen wirtsgesteins- oder sogar standortspezifischen Ausnahmen abgesehen, bislang überwiegend generische Behälterkonzepte entwickelt wurden. Quantitative Aussagen lassen sich daher oft nur sehr eingeschränkt machen, und auch qualitative Aussagen basieren vielfach auf Hypothesen und argumentativen Erwägungen.

Für die vorhandenen Transport- und Lagerbehälter (TLB) ergibt sich vor allem aus einer über deren ursprüngliche Auslegung hinausgehenden potenziellen Nutzung als Endlagerbehälter ein erheblicher Bedarf an zu erbringenden Nachweisen für die Erfüllung der an Endlagergebinde gestellten Anforderungen. Im Mittelpunkt steht hier der Nachweis der Langzeitbeständigkeit unter Berücksichtigung der endlagerspezifischen Anforderungen und Einwirkungen für eine erheblich auszuweitende Nutzungsdauer.

Unter den von den Endlagergebinden zu erfüllenden Anforderungen ist diejenige nach Bergbarkeit ausschließlich in Deutschland vorgegeben. Für sämtliche betrachteten Behälterkonzepte wären daher die an eine spätere Bergbarkeit gestellten Anforderungen, d.h. ausreichende mechanische Integrität, Handhabbarkeit und Identifizierbarkeit, noch explizit nachzuweisen.

Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021

entwickelt für Wirtsgestein	Behälterkonzept (Entwickler)	Beschreibung	Stand der Entwicklung	
	KBS-3 (SKB/Posiva Oy, Schweden, Finnland)	unabgeschirmter Doppelhüllenbehälter (Gusseisenbehälter mit massiver Kupferhülle) für Brennelemente	weit fortgeschritten im Genehmigungsverfahren (Tests für Fertigung, Beladung, Verschluss, Transport, Einlagerung)	
Kristallin	UOS (Škoda, Tschechien)	unabgeschirmter Doppelhüllenbehälter aus verschiedenen Stählen für Brennelemente	vom KBS-3 abgeleitete Konzeptstudie ("KBS-3 aus Stahl")	
	UFC-II (NWMO, Kanada)	unabgeschirmter Stahlbehälter mit dünner Kupferbeschichtung für (CANDU-) Brennelemente	fortgeschrittenes Konzept (Material-, Fertigungs- und Behältertests)	
Tonstein	Kategorie-C-Behälter (Andra, Frankreich)	unabgeschirmter Stahlbehälter für Kokillen oder Brennelemente	fortgeschrittenes Konzept (Material-, Fertigungs- und Behältertests)	
	Supercontainer (ONDRAF/NIRAS, Belgien)	in Betonkörper eingeschlossener Stahlbehälter für Brennelemente oder Kokillen	Materialtests	
	Referenzkonzept (Nagra, Schweiz)		generisches Design für BE und Kokillen	
		unabgeschirmter, robuster Stahlbehälter für Brennelemente oder Kokillen	von RWM als mögliches Referenzkonzept für Endlagerbehälter im Salz in Betracht gezogen	
Steinsalz	BSK-3 (GNS, Deutschland)	unabgeschirmte Stahlkokille für die Bohrlochlagerung von gezogenen Brennstäben oder Kokillen	Konzept in FuE-Berichten entwickelt; Einlagerungstechnik an Dummy getestet	
	POLLUX®-10 (GNS, Deutschland)	abgeschirmter Doppelhüllenbehälter (Stahl und Gusseisen) für gezogene Brennstäbe oder Kokillen	fortgeschrittenes Konzept (POLLUX®-8 als Prototyp gefertigt; Erprobung der Einlagerungstechnik)	
	Transport- und Lagerbehälter z. B. des Typs CASTOR®, (GNS, Deutschland)	abgeschirmte Transport- und Zwischenlagerbehälter aus Gusseisen oder Schmiedestahl für Brennelemente oder Kokillen	Bestehende Behälter; Endlagereignung bisher nicht betrachtet	

Tabelle 2: Kurzbeschreibung der international für hochradioaktive Abfälle entwickelten Behälterkonzepte, die hinsichtlich Übertragbarkeit auf deutsche Endlagerkonzepte im FuE-Vorhaben KoBrA betrachtet wurden (aus [2])

5.2 Entwicklung generischer Behälterkonzepte

Für die Herleitung generischer, anforderungsgerechter Behälterkonzepte wurde die in Abbildung 3 dargestellte Lösungsmatrix entwickelt. Dabei werden die benötigten Behälterfunktionen in Teilfunktionen aufgeteilt, die jeweils den generischen Komponenten eines Endlagerbehälters zugeordnet werden können. Für alle Teilfunktionen können für die jeweils benötigte Behälterkomponente technische bzw. physikalische Lösungsprinzipien zusammengestellt werden, die eine Erfüllung der Teilfunktionen durch die Behälterkomponenten ermöglichen. Die für den Behälter abhängig vom Endlagerkonzept zu erwartenden Einwirkungen dienen der Auswahl und Quantifizierung der Teilfunktionen der jeweiligen Behälterkomponenten. Durch die Erfüllung aller Teilfunktionen durch die Behälterkomponenten unter Berücksichtigung der möglichen Einwirkungen kann schließlich ein generisches Behälterkonzept (Summe der Behälterkomponenten) erstellt werden, dessen Behälterfunktionen in der Summe aller Teilfunktionen die Behälteranforderungen vollständig erfüllt.



Abbildung 3: Lösungsmatrix zur Entwicklung generischer Behälterkonzepte (aus [2] und [6]).

Als einfaches Beispiel kann ein generisches Endlagergebinde aus den Komponenten Deckel, Behälterwand einschließlich Boden (beides zusammen Behälterkörper), Inventar und möglichen technischen Hilfsmitteln bestehen. Die den grundlegenden Anforderungen – sicherer Einschluss der radioaktiven Abfälle, Abschirmung ionisierender Strahlung, Kritikalitätsausschluss, Temperaturbegrenzung, Begrenzung von Korrosion und Gasproduktion und Handhabbarkeit – zuzuordnenden Behälterfunktionen können funktionell oder komponentenspezifisch in Teilfunktionen zerlegt werden, für die technische Lösungsansätze in einer Lösungsmatrix zusammengetragen werden können. Weitere Einzelheiten hinsichtlich der Vorgehensweise und denkbarer generischer Behälterkonzepte finden sich in den Berichten [2] und [6] zum FuE-Vorhaben KoBrA.

6 Schlussfolgerungen (nach [2])

Basierend auf einem Top-Down-Ansatz (Abbildung 1) wurden in Rahmen des FuE-Vorhabens KoBrA ([2] bis [6]) zunächst die Anforderungen an Behälter für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in den Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein systematisch hergeleitet. Darauf aufbauend wurde eine Methodik entwickelt, um die in unterschiedlichen Stadien bereits entwickelten internationalen Endlagerbehälterkonzepte sowie die vorhandenen Transport- und Lagerbehälter (TLB) auf die Erfüllung der hergeleiteten Anforderungen unter Berücksichtigung der relevanten Einwirkungen hin zu untersuchen. Dieser generische Ansatz ermöglicht - vor dem Hintergrund des zu den potenziellen deutschen Wirtsgesteinen noch offene Forschungsbedarfes zur Schaffung einer konkreten geologischen Datenbasis für die in Frage kommenden Endlagerstandorte - vorrangig einen umfassenden Vergleich der verschiedenen Behälterkonzepte unter angenommenen Randbedingungen hinsichtlich der zu erwartenden Einwirkungen auf die Endlagerbehälter.

Generell können die Anforderungen nach sicherem Einschluss, Kritikalitätsausschluss, Handhabbarkeit, Rückholbarkeit und Bergbarkeit auf generischer Ebene wirtsgesteinsübergreifend betrachtet werden. Hierbei ist zu beachten, dass Forderungen nach Rückholbarkeit international nur sehr eingeschränkt und nach Bergbarkeit außerhalb Deutschlands bislang überhaupt nicht bestehen. Insofern sind weder die internationalen noch die bisherigen nationalen Behälterkonzepte, einschließlich des für das Wirtsgestein Steinsalz bis zur Anwendungsreife entwickelten und als Prototyp gefertigten POLLUX®-Behälters, hinsichtlich dieser Anforderungen konzipiert worden. Die im Arbeitspaket 4 [6] durchgeführten Analysen zeigen auf, dass eine Erfüllung der überwiegenden Anzahl der betrachteten Anforderungen durch die Behälterkonzepte KBS-3 (Schweden/Finnland), UOS (Tschechische Republik) und POLLUX® (Deutschland) sowie das Andra-Konzept (Konzept für Kategorie-C-Abfallbehälter, Frankreich) und das Nagra-Referenzkonzept (Schweiz) in den betrachteten Wirtsgesteinen mit ewG möglich erscheint. Dagegen ist die Erfüllung der hergeleiteten Anforderungen durch das belgische Supercontainer-Konzept hinsichtlich mehrerer Aspekte als fraglich anzusehen oder wäre zumindest mit großem Nachweis- bzw. Änderungsaufwand verbunden. Gleiches gilt für die Konzeptskizze der Brennstabkokille BSK (Deutschland), zu der an mehreren Stellen entsprechende Informationen fehlen. Das kanadische UFC-II-Konzept wäre aufgrund der Unterschiede zwischen dem vorgesehenen Inventar und den in Deutschland endzulagernden hochradioaktiven Abfällen grundlegend zu adaptieren, was einen Vergleich in der überwiegenden Anzahl der betrachteten Punkte derzeit nicht gestattet.

Im Ergebnis der angestellten Betrachtungen ist auch deutlich geworden, dass neben dem sicheren Einschluss und den radiologischen Anforderungen vor Allem die Erfüllung der thermischen Anforderungen mit einer allgemeinen Temperaturbegrenzung für alle Wirtsgesteine auf 100 °C gemäß Standortauswahlgesetz [1] für die Mehrzahl der betrachteten Behälterkonzepte zu einem erheblichen Nachweis- bzw. Anpassungsaufwand führen dürfte. Die Anforderung hinsichtlich Bergbarkeit, gemäß Standortauswahlgesetz [1] reduziert auf die Teilanforderungen nach Identifizierbarkeit, sicherem Einschluss und Handhabbarkeit, ist für alle Behälterkonzepte noch mit offenen Fragestellungen verbunden. Sie ist teilweise sogar auslegungsbestimmend, beispielsweise hinsichtlich des Nachweises der Langzeitbeständigkeit. Der sichere Einschluss über einen Nachweiszeitraum von 1 Mio. Jahren für (kristalline) Wirtsgesteine ohne ausweisbaren ewG erscheint nach vorliegenden Informationen und unter bestimmten Annahmen nur bei zwei bislang entwickelten Behälterkonzepten (KBS-3 und UFC-II) mit einer gewissen Erfolgsaussicht verbunden.

Eine Erfüllung der Anforderungen an Endlagergebinde durch die vorhandenen Transport- und Lagerbehälter (TLB) ist in weiten Teilen mit umfangreichen offenen Fragestellungen verbunden, insbesondere hinsichtlich des Langzeit- und Materialverhaltens unter Endlagerbedingungen. Erschwerend kommt hinzu, dass es sich bei den TLB um eine hoch diversitäre Gruppe vieler verschiedener Behältertypen mit sehr unterschiedlichen radioaktiven Inventaren handelt, die nicht zum Zweck der späteren Endlagerung konzipiert und entwickelt wurden.

Anhand einer direkt mit dem im Vorhaben entwickelten Top-Down-Ansatz zur Erstellung anforderungsgerechter Behälterkonzepte (siehe Abbildung 3) kombinierbaren Methodik wurden exemplarisch generische Behälterkonzepte hergeleitet, die die Erfüllung der grundlegenden Behälteranforderungen bzw. damit verknüpften Behälterfunktionen in den verschiedenen potenziellen Wirtsgesteinen erwarten lassen, siehe [6]). Die gewählte Methodik einer Lösungsmatrix für technischwissenschaftliche Lösungsprinzipien von Teilfunktionen zeigt trotz mehrerer einschränkender Grundannahmen noch immer den Variantenreichtum eines möglichen Entwurfsraumes auf. So wurden für die drei potenziellen Wirtsgesteine insgesamt 20 generische Konzepte für selbstabschirmende Behälter hergeleitet, die jeweils alle grundlegend benötigten Behälterfunktionen aufweisen. Bei einer realistischeren Anwendung dieses Ansatzes ist u. a. durch den höheren Detailierungsgrad an zu betrachtenden Teilfunktionen und Einwirkungen mit einer Vielzahl möglicher Behälterkonzepte zu rechnen. Diese Behälterkonzepte können entsprechend der Relevanz der zu erwartenden Einwirkungen weiter optimiert werden, und die Anzahl von generischen Behälterkonzepten muss letztlich durch herzuleitende Auswahlund Bewertungskriterien weiter reduziert werden. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass dieser Entwicklungsund Entscheidungsprozess im laufenden Standortauswahlverfahren hinsichtlich Behälterkonzepten für alle drei in Frage kommenden Wirtsgesteine erfolgen muss. Um den damit verbundenen Aufwand in realisierbaren Grenzen zu halten, kommt der systematischen und nachvollziehbaren Optimierung und Einengung geeigneter Behälterkonzepte eine entscheidende Bedeutung zu.

Unter Berücksichtigung der engen zeitlichen Vorgaben des Standortauswahlgesetzes, bis 2031 die Entscheidung über den Endlagerstandort herbeizuführen [1], muss über das für diesen Standort benötigte Endlagerkonzept einschließlich des zugehörigen Behälterkonzeptes bereits frühzeitig entschieden werden. Vor diesem Hintergrund sind vor allem robuste und pragmatische Lösungsansätze (z.B. Adaption bereits entwickelter Behälterkonzepte) zu bevorzugen, die eine termingerechte Behälterbereitstellung in großer Stückzahl in der benötigten Qualität ermöglichen. Angesichts der Bedeutung der zeitlichen Vorgaben und der Anforderungen an die Transparenz des Standortauswahlverfahrens sollte die Herleitung und Vorgabe der Auswahl- und Entscheidungskriterien für geeignete Endlagerbehälterkonzepte daher möglichst zeitnah und übergeordnet erfolgen.

Danksagung

Die diesem Beitrag zugrunde liegenden Forschungsarbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi), vertreten durch den Projektträger Karlsruhe, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), unter den Förderkennzeichen 02E11527 und 02E11537 gefördert.

Referenzen

- Deutscher Bundestag, "Standortauswahlgesetz vom 5. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), das zuletzt durch Artikel 2 Absatz 16 des Gesetzes vom 20. Juli 2017 (BGBl I S. 2808) geändert worden ist," in Bundesgesetzblatt Jahrgang 2017 Teil I Nr. 26, Bonn, Bundesanzeiger Verlag, 2017, pp. 1074-1102.
- [2] W. Bollingerfehr, S. Prignitz, A. Wunderlich, C. Herold, T. Orellana Pérez, H. Völzke und D. Wolff, "Abschlussbricht zum FuE-Verbundvorhaben KoBrA: Anforderungen und Konzepte für Behälter zur Endlagerung von Wärme entwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein," BGE TEC 2020-19, BAM 3.4/3205-1, Peine und Berlin, 11. September 2020.
- [3] C. Herold, H. Völzke, T. Orellana Pérez und D. Wolff, "FuE-Vorhaben KoBrA Bericht zum Arbeitspaket 1: Nationaler und Internationaler Stand zu bereits existierenden Anforderungen und Konzepten für Endlagerbehälter," Berlin, 2020.
- [4] S. Prignitz, A. Wunderlich und W. Bollingerfehr, "FuE-Vorhaben KoBrA Bericht zum Arbeitspaket 2: Behälterrelevante Randbedingungen und Beanspruchungen in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein," Peine, 2020.
- [5] A. Wunderlich, S. Prignitz, W. Bollingerfehr, H. Völzke, C. Herold, D. Wolff und T. Orellana Pérez, "FuE-Vorhaben KoBrA
 Bericht zum Arbeitspaket 3: Herleitung und Zusammenstellung von Anforderungen an Endlagerbehälter für hochradioaktive Abfälle," BGE TECHNOLOGY GmbH, Peine, 2020.
- [6] C. Herold, H. Völzke, T. Orellana Pérez, D. Wolff, A. Wunderlich, W. Bollingerfehr und S. Prignitz, "FuE-Vorhaben KoBrA - Bericht zum Arbeitspaket 4: Erarbeitung von Vorschlägen für mögliche Behälterkonzepte in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein," BAM, Berlin, 2020.
- [7] Deutscher Bundestag, "Sechzehntes Gesetz zur Änderung des Atomgesetzes (16. AtGÄndG) vom 10. Juli 2018," in Bundesgesetzblatt Jahrgang 2018 Teil I Nr. 25, Bonn, Bundesanzeiger Verlag, 2018, pp. 1122-1123.
- [8] Deutscher Bundestag, "Strahlenschutzgesetz vom 27. Juni 2017 (BGBl. I S. 1966), das zuletzt durch Artikel 11 des Gesetzes vom 12. Dezember 2019 (BGBl. I S. 2510) geändert worden ist," in Bundesgesetzblatt Jahrgang 2017 Teil I Nr. 42, Bonn, Bundesanzeiger Verlag, 2017, pp. 1966-2067.
- [9] Bundesministerium für Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU), Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung Wärme entwickelnder radioaktiver Abfälle, Bonn, 2010.
- [10] "Verordnung über Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (Endlagersicherheitsanforderungsverordnung - EndlSiAnfV)," Endlagersicherheitsanforderungsverordnung vom 6. Oktober 2020 (BGBl. I S. 2094).
- [11] Entsorgungskommission (ESK), "EMPFEHLUNG der Entsorgungskommission Anforderungen an Endlagergebinde zur Endlagerung Wärme entwickelnder radioaktiver Abfälle," ESK-Geschäftsstelle, Bonn, 2017.
- [12] W. Filbert, M. Breustedt, S. Dörr, P. Herold, C. Lerch, J. Wolf, D. Ullmann, F. Kristek und W. Sindern, "DIREGT III (Direkte Endlagerung von Transport- und Lagerbehältern bis 160 Mg): Abschlussbericht," DBE TECHNOLOGY, Peine, 2014.

Berechnung des teufenabhängigen Flächenbedarfs für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle im kristallinen Wirtsgestein

E. Simo^a, N. Bertrams^a, T. Lohser^b

^aBGE TECHNOLOGY GmbH ^bBGE mbH

Key words: Flächenbedarf, Endlagerfläche, Thermische Auslegung, Endlagerplanung

1 Einleitung

Die Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE) ist für die Durchführung des Standortauswahlverfahrens entsprechend des Gesetzes zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (StandAG) [1] zuständig. Im Zuge dieses Verfahrens benötigt die BGE quantitative Aussagen zu den Flächenbedarfen eines Endlagers in verschiedenen Wirtsgesteinen und Endlagerteufen als Grundlage für die Bewertung des Indikators "flächenhafte Ausdehnung bei gegebener Mächtigkeit" nach Anlage 2 (zu § 24 Absatz 3) StandAG [1].

Der Flächenbedarf eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle hängt von verschiedenen Faktoren ab. Für ein spezifisches Endlager- und Behälterkonzept bestimmen insbesondere die Gebirgstemperatur und die Wärmeleitfähigkeit des Gebirges die Menge an hochradioaktiven Abfällen, die pro Flächeneinheit eingelagert werden können, ohne die maximal zulässige Auslegungstemperatur zu überschreiten. Die Gebirgstemperatur in der Umgebung des Endlagers ist von dem geothermischen Gradienten und der Endlagerteufe abhängig, welche somit eine maßgebliche Einflussgröße auf die Endlagerfläche darstellt. Ebenso muss die Endlagerteufe bei der technischen Konzeption des Endlagers berücksichtigt werden. In größeren Teufen ist mit höheren Gebirgsspannungen zu rechnen, was beispielsweise in die Planung stabilitätssichernder Maßnahmen, wie größere Streckenabstände oder tragenden Ausbau, eingehen muss. Daraus folgt, dass sich der Flächenbedarf eines Endlagers unter Umständen signifikant mit Zunahme der Endlagerteufe vergrößert. Im Rahmen der vorgestellten Arbeiten wird dieser Flächenbedarf für kristallines Wirtsgestein quantifiziert.

2 Methodik

Die Berechnung der Endlagerfläche basiert auf dem aktualisierten Abfallmengengerüst aller in Deutschland vorhandenen und noch anfallenden hochradioaktiven Abfälle sowie deren thermischen Leistungen [0]. Für die Berechnung des Flächenbedarfs im kristallinen Wirtsgestein wurde ein Endlagerkonzept analog zum skandinavischen KBS-3 Konzept zur Einlagerung in vertikalen Bohrlöchern zugrunde gelegt. Die Abstände der Bohrlöcher und die Beladung der Behälter wurden so gewählt, dass an der Außenfläche der Behälter die Grenztemperatur von 100 °C gemäß § 27 Abs. 4 StandAG nicht überschritten wird.

Auf Basis der thermischen Auslegung eines Einzelbehälters in unterschiedlichen Teufen für unterschiedliche Bohrlochabstände und Behälterbeladungen wurde eine Endlagerfläche berechnet. Dies erfolgte insbesondere für drei Fälle:

- 1. Für einen technisch bedingten minimalen Behälterabstand von 7 m.
- 2. Für eine Beladung von 90 % der (aus thermischen Gründen) maximalen Beladung der Behälter.
- 3. Für eine Beladung von 95 % der (aus thermischen Gründen) maximalen Beladung der Behälter.

Alle Berechnungen wurden für einen gebirgsmechanisch bedingten Mindestabstand der Einlagerungsstrecken von 21 m durchgeführt.

3 Ergebnisse

Die Ergebnisse der Berechnungen sind in Abbildung 1 dargestellt. Sie basieren auf einem Endlagerlayout, das eine Feldbreite von 500 m \pm 20 m vorsieht.

Der geringste Flächenbedarf ergibt sich für den Fall einer Einlagerung mit minimalem Behälterabstand. Für diesen Fall kann eine Beladung von 70 % bis 72 % der maximalen Beladung der Behälter erreicht werden,



ohne dass die Grenztemperatur überschritten wird. Die dadurch erreichte Verringerung der Endlagerfläche ist mit einer entsprechend erhöhten Behälteranzahl verbunden.

Abbildung 1: Flächenbedarf für ein Endlager im kristallinen Wirtsgestein als Funktion der Teufe (Grenztemperatur = 100 °C; Feldbreite: 500 ± 20 m, Streckenabstand: 21 m). Die Prozentangaben geben die Beladung der Behälter im Verhältnis zur (aus thermischer Sicht) maximal möglichen Beladung für den gegebenen Streckenabstand wieder.

In Abbildung 1 lassen sich für die unterschiedlichen Teufen und Behälterbeladungen die berechneten Flächenbedarfe ablesen. Dazu ist anzumerken, dass die hier berechneten Flächenbedarfe die theoretisch kleinsten Flächen für das gewählte Endlagerlayout im kristallinen Wirtsgestein darstellen. Unter Berücksichtigung der erwarteten Klüftigkeit und der häufig großen räumlichen Veränderlichkeit der hydraulischen und geomechanischen Barriereeigenschaften von kristallinen Gesteinen ist bei standortbezogener Endlagerplanung mit größeren Flächenbedarfen zu rechnen. Zudem ist bei der Auffahrung des Endlagers davon auszugehen, dass einige Strecken und Bohrlöcher als ungeeignet verworfen werden müssen, woraus ebenfalls ein erhöhter Flächenbedarf resultiert. Zur Bewertung, inwieweit sich ein Gebirgsbereich zur Einlagerung eignet, ist eine Methode vergleichbar mit dem RSC-Verfahren (,,<u>R</u>ock <u>S</u>uitability <u>C</u>lassification") von POSIVA/Finnland [Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.] denkbar, das die Ausweisung geeigneter Gebirgsbereiche auf der Grundlage von Gesteinsbewertungskriterien vorsieht.

Literaturquellen

[Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.] McEwen, T., Aro, S., Kosunen, P., Mattila, J., Pere, T., Käpyaho, A. & Hellä, P. (2012). Rock suitability classification - RSC 2012, Report POSIVA 2012-24, Posiva Oy, Eurajoki, ISBN 978-951-652-205-3

^[1] StandAG: Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz) vom 5. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), das zuletzt durch Artikel 247 der Verordnung vom 19. Juni 2020 (BGBl. I S. 1328) geändert worden ist.

^[2] Bollingerfehr, W., Bertrams, N., Minkley, W., Buhmann, D., Mönig, J., Eickemeier, R., Popp, T., Fahland, S., Prignitz, S., Filbert, W., Reinhold, K., Hammer, J., Simo, E., Kindlein, J., Thiemeyer, T., Knauth, M., Völkner, E., Liu, W. & Wolf, J., Concept developments for a generic repository for heat-generating waste in bedded salt formations in Germany – KOSINA (2018)
Ausbau von Grubenbauen für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in Tongestein

P. Herold^a, E. Simo^a, H.-J. Engelhardt^a, H. Räuschel^a, J. Te Kook^b, B. Pflüger^b, C. Scior^b, A. Studeny^b, M. Manica^c, T. Meyer^d

^aBGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine
 ^bDMT GmbH & Co KG, Am Tüv 1, 45307 Essen
 ^cUniversidad Nacional Autónoma de México, Coyoacán, 04510 Mexico City
 ^dGRS gGmbH, Theodor-Heuss-Straße 4, 38122 Braunschweig

Key words: Tonstein, Ausbau, Beton, low-pH

1. Abstract

Das Einbringen eines Ausbaus in die Grubenräume eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle ist zwingend zur Gewährleistung der betrieblichen Sicherheit während des Endlagerbetriebs nötig. Gleichzeitig kann ein vorhandener Ausbau auch die Möglichkeit der Rückholung und den Nachweis der Langzeitsicherheit beeinflussen. So wird beispielsweise auch im StandAG als ein Indikator für günstige gebirgsmechanische Eigenschaften gewertet, wenn das "... Gebirge als geomechanisches Haupttragelement die Beanspruchung aus Auffahrung und Betrieb ohne planmäßigen tragenden Ausbau, abgesehen von einer Kontursicherung, bei verträglichen Deformationen aufnehmen" kann. Es ergibt sich somit ein Spannungsfeld mit teils gegensätzlichen Anforderungen an einen Ausbau für das zukünftige Endlager für hochradioaktive Abfälle. Mit dem vom BMWi/PTKA geförderten FuE-Vorhaben "Ausbau von Grubenbaue für ein HAW-Endlager in Tongestein – AGEnT" erarbeiteten BGE TECHNOLOGY GmbH und DMT GmbH & Co. KG gemeinsam die Anforderungen zur Auslegung von Ausbauten im Grubengebäude eines Endlagers in Tongestein. Darüber hinaus wurden grundlegende technische Lösungen für einen solchen Ausbau entwickeltet und Wechselwirkungen der dafür in Betracht kommenden Baustoffe mit dem potenziellen Wirtsgestein inkl. Porenwässern untersucht.

Ausgehend von den aus anderen FuE-Vorhaben bekannten Daten über potenzielle Wirtsgesteinsformationen in Deutschland und definierten betrieblichen Anforderungen wurde das Zusammenwirken von Gebirgsdruck (bei unterschiedlichen Teufen) Gebirgseigenschaften und Hohlraumgeometrie und Ausbau über Variationsrechnungen untersucht. Je nach Art und Funktion des Grubenbaus und des geologischen Umfeldes konnten so günstige Eigenschaften identifiziert werden.

In den "kurzlebigen" Einlagerungstrecken (Standzeit i 1 Jahr) sind im Allgemeinen bis 1000 m Teufe Bogenstrecken mit Betonausbau (sogar ohne Stahlbögen) einsetzbar sofern eine Stoßwanderung von 10 % der Ausgangsbreite akzeptabel ist und einmalige Senkarbeiten zur Beseitigung der Hebung der Streckensohle durchgeführt werden.

Aus dem Einlagerungskonzept geht hervor, dass für den Betrieb bis zu max. 9 Einlagerungsstrecken nebeneinander geöffnet sein können. Unter Berücksichtigung dieser Annahme, haben die geotechnischen Modellrechnungen gezeigt, dass der aus thermischen Gründen erforderliche Abstand zwischen zwei benachbarten Einlagerungstrecken von 20 m in einer Teufe von 1000 m und einer Druckfestigkeit des Tonsteins von 20 MPa unzureichend ist. Hier sollte der Mindestabstand zwischen benachbarten Einlagerungstrecken das Vierfache der Streckenbreite (32 m) betragen. Dies würde den Flächenbedarf für ein Endlager erheblich erhöhen. Deshalb sollten bei der Entwicklung künftiger Endlagerkonzepte Möglichkeiten geprüft werden, die keine gleichzeitige Öffnung mehrerer benachbarter Einlagerungstrecken erfordern. Im Gegensatz zu den Einlagerungsstrecken, welche sich durch eine kurze Standzeit mit anschließender Verfüllung auszeichnen, müssen die Hauptstrecken für die gesamte Lebensdauer des Endlagerbergwerkes (bis zu 50 Jahre) standsicher dimensioniert werden. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass Quell und Kriechbewegungen des Tonsteins nicht ausgeschlossen werden können. Dies führt zu dem Ergebnis, dass in großen Teufen extrem aufwendige geschlossene Ausbausysteme mit diversen Nachgiebigkeitselementen eingesetzt werden müssen.

Beispielhaft für ein solches System wurden mit Hilfe vollständig gekoppelter hydromechanischer Berechnungen die Wechselwirkungen zwischen einem Tübbingausbau mit Hinterfüllung auf die Ausprägung der Auflockerungszone (ALZ) in einem Teufenbereich von 800 m während der vorgesehenen Nutzungsdauer untersucht. Durch die Hinterfüllung können die auf den Tübbingring übertragene Last begrenzt und somit die internen Kräfte des Tübbingsrings deutlich reduziert werden. Dies verursacht jedoch weitere Auflockerung des Tongesteins, was zu einer größeren ALZ führt. Die erzielten Ergebnisse zeigen, dass die Verwendung der kompressiblen Hinterfüllung eine Optimierung zwischen der Schädigung im Gebirge und der Größe der inneren Kräfte im Ausbau erlaubt. Damit konnte gezeigt werden, dass eine kompressible Hinterfüllung die Möglichkeit bietet, Wechselwirkungen zwischen dem Gebirge und dem Ausbau gezielt zu kontrollieren.

Als Ausbaumaterial wurde ein low-pH Baustoff (pH \approx 9) entwickelt. Die Baustoffrezeptur erlaubt den Einsatz als Ort- oder Fertigbeton der Festigkeitsklasse C50/60. Eine Weiterentwicklung für einen Spritzbetoneinsatz ist ebenso möglich. Zur Bewertung der Entwicklung des im Grubengebäudes verbleibenden Ausbaus während der Nachverschlussphase, wurden zunächst durch eine Literaturrecherche die zu erwarteten Korrosionsprozesse und Wechselwirkungen identifiziert. Parallel wurden Transportrechnungen durchgeführt. Im Fokus stand dabei der entwickelte Baustoff in Interaktion mit Porenwässern wie sie in nord- und süddeutschen Tongesteinsformationen zu erwarten sind. Mit Hilfe der Modellrechnungen und aus der Literatur bekannten Beziehungen zwischen Korrosionsvorgängen und Baustoffeigenschaften konnte so eine erste vorsichtige Prognose über das Ausbauverhalten bzw. dessen Beständigkeit in der Nachverschlussphase bestimmt werden. Damit können auch die Auswirkungen auf die Versatzkompaktion besser beurteilt werden.

Mit dem vorliegenden Beitrag sollen die Erkenntnisse des FuE-Vorhabens AGEnT vorgestellt werden. Die Arbeiten liefern einen Beitrag zur Beurteilung geomechanisch günstiger Gebirgseigenschaften im Tongestein und den anforderungsgerechten Ausbau der Grubenbaue.

EURAD Knowledge Management – Work Package "State-of-Knowledge"

T. Knuuti^a, Christian Zehrt^a, Carola Franzen^b, Dinara Abbasova^b, Inna Iarmosh^c, Oleksii Tokarevskyi^c, Thuro Arnold^b, Vinzenz Brendler^b, A. Göbel^b

^aBundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE mbH), Germany ^bHelmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V. (HZDR), Germany ^cState Enterprise State Scientific And Technical Center For Nuclear And Radiation Safety (SSTC NRS), Ukraine

Key words: Knowledge Management, State-of-Knowledge, EURAD, Radioactive Waste Management

1. EURAD Knowledge management

As a result of intensive RD&D work a lot of knowledge has been gained during the last decades supporting the safe management and disposal of radioactive waste. Organising, preserving, updating, and making all this knowledge available to end-users in a way that is most beneficial is a challenging and complex task. This important role of Knowledge Management (KM) is also realised by EURAD, the European Joint Programme on Radioactive Waste Management (RWM), which was established in 2019 to coordinate RD&D and Knowledge Management activities and to support EU Member States with the safe management and disposal of radioactive waste. In order to organise the different topics relevant to RWM into hierarchical categories and allow clear definition, organisation and communication, a generic EURAD Roadmap/GBS (Goals Breakdown Structure) was developed by EURAD. This structure is not only useful for RD&D activities, but also for KM. EURAD's commitment to Knowledge Management is reflected in a number of different activities, which are being conducted by dedicated Work Packages. These activities include for example the organisation of courses and trainings, the production of guidance documents and the implementation of a mobility programme to foster international exchange. Another important component of KM in EURAD is capturing the current State-of-Knowledge (SoK) in topics relevant to radioactive waste management and its transfer to end-users. This will be done through dedicated documents, the State-of-Knowledge documents.

2. Work Package "State-of-Knowledge" (SoK)

The main goal of this Work Package is the generation and dissemination of SoK documents. For this, a two-tier approach is followed. On one hand, a KM System, including an IT-solution, will be developed that allows organisation and access to all relevant KM components (SoK documents, guidance documents, training material, SotA reports, etc.). This system will take into account the EURAD Roadmap structure and end-user requirements to achieve maximum end-user benefit. For the design of the EURAD KM System, experiences from already existing systems serve as a valuable source of information. To benefit from these "lessons learned" and "best practice solutions", a screening of existing KM Systems in different organisations in the field of RWM is currently being conducted. Results obtained will be an integral part of the next steps, the design and development of the EURAD KM System.

The other important component addressed in this Work Package is the generation of the SoK documents. These documents will be compiled by internationally recognized experts, who are asked to express their experts' view on the most relevant knowledge and associated uncertainties in a specific topic. It is important to note that these SoK documents will be different from State-of-the-Art documents (SotA). The SoK documents are designed to provide a comprehensive higher level overview, whilst SotA documents go much more into detail on a much narrower topic. However, the SoK documents will signpost to other important documents and resources, such as SotA reports. This will allow the endusers to easily navigate to knowledge on the appropriate level of detail. The topics of the SoK documents are defined according to the generic EURAD Roadmap/GBS (Goals Breakdown Structure). The SoK documents are aligned with the lowest level of the categories (domains). Higher level documents will also be prepared in EURAD, thus creating a clear "axis of knowledge". In the first phase of EURAD, approaches for the production of the SoK documents were developed and are currently being tested in an agile manner in the context of two demonstration cases. For each demonstration case, a team of three top-level experts was selected and contacted to secure their involvement in the production of these SoK documents. Together with the Work Package, the scope, way of working and other details for the SoK document were discussed and agreed by the expert team. This laid the groundwork for the subsequent drafting phase, eventually resulting in a finalised SoK document. The outcomes of these demonstration cases will allow to refine and improve the methods, and also provide mature SoK documents that will be of use for end-users. Production of prioritised SoK document will commence immediately after the demonstration cases and continue throughout the whole EURAD programme. All of the work is performed in an agile, learning by doing approach. Exchanging with and learning from other actors is an integral part of EURAD KM. For example, close interaction with RD&D Work Packages in EURAD will be implemented to secure the integration and utilization of expertise held in these Work Packages into the KM System, for example in the form of SotA reports or training initiatives. Another highly important aspect will be the collection and utilisation of end-user feedback. Methods for active and passive end-user feedback for the SoK documents as well as the KM System in total will be developed and applied. The combination of all of these efforts will allow to set up a sustainable and long-lasting EURAD KM Programme, with the continuing production of SoK documents as one integral part. First outcomes of the demonstration cases, challenges and "lesson learned" will be presented here, as well as a general outlook on the upcoming tasks and milestones.

OpenGeoSys Workflows -Modelling Platform for Multi-Field Processes in Deep Geological Repositories

Olaf Kolditz^{a,b,d}, Markus Barsch^c, Lars Bilke^a, Jörg Buchwald^a, Aqeel Chaudhry^c, Chaofan Chen^a, Shuang Chen^a, Tengfei Deng^c, Thomas Fischer^a, Norbert Grunwald^{a,c}, Sonja Kaiser^a, Thomas Kalbacher^a, Dominik Kern^c, Renchao Lu^c, Tobias Meisel^a, Boyan Meng^a, Mostafa Mollaali^a, Vanessa Montoya^a, Dmitri Naumov^c, Francesco Parisio^c, Karsten Rink^a, Jaime Garibay Rodriguez^a, Ozan Sen^a, Christian Silbermann^c, Haibing Shao^a, Wenqing Wang^a, Norihiro Watanabe^e, Keita Yoshioka^a, Florian Zill^{a,c}, Thomas Nagel^{c,d}

> ^aHelmholtz Centre for Environmental Research UFZ ^bTechnische Universität Dresden ^cTechnische Universität Freiberg ^dTUBAF-UFZ Centre for Environmental Geosciences ^eNational Institute of Advanced Industrial Science and Technology AIST, Japan

1. Introduction

OpenGeoSys $(OGS)^1$ is a scientific open-source initiative for the numerical simulation of thermo-hydro-mechanical/chemical (THMC) processes in porous and fractured media. The basic concept of OGS consist on providing a flexible numerical framework, using primarily the Finite Element Method (FEM) for solving multi-field coupled processes with application in different scientific and technical disciplines. For example, OGS has been successfully applied in the fields of regional, contaminant and coastal hydrology, technical and geothermal energy systems, geotechnical engineering, energy storage, CO2 sequestration/storage and nuclear waste management and disposal. The actual version OGS-6 is targeted at developing seamless workflows starting from data integration, HPC for coupled process simulation and using virtual reality (VR) concepts for data analytics. OGS-6 is developed and maintained platform-independently using professional software engineering tools such as version management (GitLab²) and containerization (e.g. Docker, Singularity). A strict code review is conducted for quality assurance completed by unit testing and comprehensive benchmarking. OGS provides an open interfaces for working closely with other simulators (see below) including Python bindings.

2. OpenGeoSys Poster Session

In order to present different features of the workflow concept a poster session with following topics is planned:

- Software-Engineering and code design: As described above, OGS is developed as an open source project using several development tools such as GitLab, GitLab CI, Doxygen etc. to assure code quality throughout the entire development process starting from code design, units tests, automated benchmarking up to comprehensive case studies in various application areas [1]. Recent developments allow running OGS in containers and therefore allow for easily moving executable code and data between different hardware platforms such as regular workstations and HPC environments.
- Reactive Transport Processes (OGS-RTP): Different approximations have been implemented in OGS along its development in order to consider multicomponent mass transport and bio/geochemical reactions. For example, it has been used internal OGS library to simulate kinetically controlled bio-geochemical reactions. In other cases, OGS has been coupled with well-known external geochemical

¹https://www.opengeosys.org

²https://code.opengeosys.org

solvers (i.e. PHREEQC, GEMS, BRNS and ChemApp). Very recently, an alternative coupling solution of reactive transport has been developed and implemented by approximating the complex chemical reactions into a quickly calculating look-up table. The novel implementation provides fast and efficient simulations, a feature especially relevant for long-term simulations. New benchmarks are available through the OGS website³.

- Coupled processes (OGS-TH²M): The coupled non-isothermal two-phase flow in deformable porous media largely benefits from the new OGS-6 architecture by utilizing algebraic libraries (Eigen) and customizing an own material property library (MPL). A large suite of benchmarks has been developed for testing the various couplings.
- Coupled processes (OGS-TRM): Complementary, a non-isothermal Richards mechanics is also available based on the Richards approximation for unsaturated flow (i.e. immobile gas phase). This new member in the OGS model family has been tested recently in DECOVALEX 2023 for the analysis of the FE experiment in the Underground Research Lab in Mont Terri.
- Fracture mechanics (OGS-VPF/NLD/LIE): Various approaches for modelling fracturing processes within the context of the finite element method are available in OGS-6, i.e. variational phase fields, non-local deformation, and the lower interface element methods [2].
- Groundwater modeling: Impacts on groundwater systems surrounding potential geological repositories have taken into account for safety assessment investigations. To this purpose, THMC processes can be potentially emplaced into OGS groundwater models for near to far field analysis.
- Uncertainty workflows: For the purpose of uncertainty quantification and sensitivity analysis, we utilize an experimental design-based history-matching workflow that is wrapped around OpenGeoSys making use of observational/experimental data and using surrogate modelling as well. Due to the huge python ecosystem the workflow is very extendible and highly customizable [3].
- High-performance-computing (OGS-HPC): Computational efficiency became a key factor for realworld applications of complex THMC. OGS provides generic parallelization scheme applicable to the entire range of THMC processes. Recent HPC applications have been conducted for large scale experiments in Opalinus and Callovo-Oxfordian clays in Switzerland and France, respectively. Generic repository concepts have been also evaluated for creatious clay formations in Northern Germany.
- Visualization (OGS-VR): Once simulation results have been calculated, they can be visualised together with input datasets and data acquired from observation sites in a unified geographical context, using techniques specifically designed for the analysis of numerical simulation results. This allows for extensive data exploration, verification of simulation results and comparison with measured data. As such, data visualisation supports the presentation of result to stakeholders and the knowledge transfer to other researchers and the interested public [4].

Geological repositories are also related to the potential of deep and shallow geothermal resources. OGS developments include modelling tools for risk assessment [5] and for the design of borehole heat exchanger arrays [6].

- L. Bilke et al. Development of open-source porous media simulators: Principles and experiences. Transport in Porous Media, 130(1):337–361, 2019.
- [2] K. Yoshioka et al. Comparative verification of discrete and smeared numerical approaches for the simulation of hydraulic fracturing. *GEM International Journal on Geomathematics*, 10(1), 2019.
- [3] J Buchwald et al. Doe-based history matching for probabilistic uncertainty quantification of thermo-hydro-mechanical processes around heat sources in clay rocks. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 134:104481, 2020.
- [4] K Rink et al. A Virtual Geographic Environment for Multi-Compartment Water and Solute Dynamics in Large Catchments. J Hydrol, 582:art. 124507, 2020.
- [5] F. Parisio et al. The risks of long-term re-injection in supercritical geothermal systems. Nature Communications, 10(1), 2019.
- [6] S. Chen et al. Shifted thermal extraction rates in large borehole heat exchanger array a numerical experiment. Applied Thermal Engineering, 167, 2020.

³https://www.opengeosys.org/docs/benchmarks/reactive-transport/radionuclide/radionuclide/

Entwicklung eines Referenzmodells zur thermischen Modellierung eines Endlagerbehälters im deutschen Kristallingestein mit Hilfe von FEFLOW

Michael Werres^{a,b}, Klaus-Jürgen Röhlig^b, Wolfram Rühaak^a

^aBundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE), Peine ^bTechnische Universität Clausthal

Key words: Sicherheitsuntersuchung, thermische Modellierung, Behälterentwicklung, Endlagerkonzepte

Vorläufige Sicherheitsuntersuchungen sind eine wesentliche Komponente für die Standortauswahl eines Endlagers für hoch radioaktive, wärmeentwickelnde Abfallstoffe. Im Rahmen dieser vorläufigen Sicherheitsuntersuchung ist nach § 27 Absatz 4 StandAG zu prüfen, ob eine Grenztemperatur von 100 °C an der Außenwand der Endlagerbehälter überschritten wird. Aus diesem Grund werden numerische Modellierungen der Temperaturentwicklung des Endlagersystems durchgeführt. Es wurde ein hoch aufgelöstes numerisches 3-D Modell eines einzelnen Endlagerbehälters, der im Kristallingestein eingelagert wird, entwickelt. Es wird bei dieser Modellierung kein Wärmetransport über Wasser oder Gas betrachtet, sondern nur Wärmeleitung. Das Referenzmodell ist hat die Aufgabe für den gewählten Parametersatz exakte numerische Ergebnisse der Temperaturverteilung um einen Endlagerbehälter zu liefern. Es soll anschließend zur Kalibration vereinfachter Behältermodelle herangezogen werden, die die Modellierung eines ganzen Endlagersystems ermöglichen.

Das 3-D Referenzmodell wurde mit Hilfe des Programms FEFLOW 7.3.4 [1] erstellt. Es bildet einen homogenen Kristallingesteinskörper in einem Teufenbereich von 0 m bis 1500 m ab. Das Gestein wurde entsprechend den Erkenntnissen am Referenzstandort Heubach [2] in der Mitteleuropäischen Kristallinzone parametrisiert. Entsprechend dieser Parametrisierung wurde am oberen Modellrand eine Dirichlet Randbedingung von 10 °C und am unteren Modellrand in 1500 m Teufe eine Randbedingung von 58.9 °C gesetzt. Die horizontale Erstreckung beträgt jeweils 1 km; die seitlichen Ränder sind undurchlässige Neumann Randbedingungen. Im Zentrum des Modells in einer Teufe von ca. 785 m ist ein einzelner Endlagerbehälter mit den zugehörigen Barrieresystemen [3, 4] platziert. Die Geometriedaten und Materialparameter des Endlagerbehälters und der weiteren Barrieren entsprechen den Angaben des finnischen Endlagerbehälters für EPR-Brennelemente [4, 5]. Die Wärmeproduktion der abgebrannten Brennelemente wurde in Form von vier transienten Wärmequellen im Inneren des Behälters abgebildet. Die Parametrisierung erfolgte ebenfalls nach dem finnischen EPR-Brennelementtyp [4]. Da keine Daten vorliegen, die zeitlich das Aufsättigen und Quellen der Bentonitbarriere quantifizieren, werden Behelfsweise für das Referenzmodell zwei Extrema betrachtet. Zum einen wird ein Parametersatz gewählt, der die Situation unmittelbar nach Einlagerung des Endlagerbehälters abbildet, zum anderen wird ein vollständig mit Lösung aufgesättigtes Endlagersystem betrachtet. Die Simulationsdauer beträgt 10,000 Jahre.

Für den ersten Fall ergibt sich im Maximum eine Oberflächentemperatur des Behälters von 109 °C. Bei der Betrachtung eines aufgesättigten Endlagersystems ergibt sich eine Temperatur von 83 °C. In beiden Fällen wird diese Maximaltemperatur nach zwischen dem ersten und dem zweiten Jahr der Einlagerung erreicht.

In den erstellten vereinfachten 3-D Modellen des Referenzstandortes wird der Behälter vereinfacht in Form einer einzelnen Punktquelle abgebildet. Ausgehend von einem Modell mit einem einzelnen Behälter wird ein vereinfachtes Modell mit 20 Behältern aufgebaut.

Das Modell liefert für den gewählten Parametersatz bei einer akzeptablen Rechendauer von weniger als 12 Stunden plausible Ergebnisse für den Temperaturverlauf an der Behälteroberfläche und ist grundsätzlich als Referenzmodell für nachfolgende vereinfachte Modelle geeignet. Die Überlegungen zur Vereinfachung des Modells erscheinen geeignet, die Ergebnisse des Referenzmodells abzubilden.

- Diersch, H.-J. (2014): FEFLOW Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media, Springer, Berlin, Heidelberg
- [2] Steiner, S. (2014): Mitteltiefe Erdwärmesonde Heubach: Thermische Modellierung der Untergrundverhältnisse im laufenden Betrieb, Masterarbeit TU Darmstadt
- [3] Juvankoski, M. (2012): Buffer Design 2012, POSIVA 2012-14, POSIVA OY, Olkiluoto
 [4] Ikonen, K. und Raiko, H. (2012): Thermal Dimensioning of Olkoluoto Repository for Spent Fuel, POSIVA Working Report 2012-56, POSIVA OY, Olkiluoto
- [5] Raiko, H. (2005): Disposal Canister for Spend Nuclear Fuel Design Report, POSIVA 2005-02, POSIVA OY, Olkiluoto

Tagesanlagen eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle

F. Schlüter^a, D. Gawletta^a, J. Dannemann^a, T. Lohser^a

^aBereich Standortauswahl, Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE)

Key words: Tagesanlagen, Flächenbedarf, Endlager

Mit Blick auf das künftige Endlager für hochradioaktive Abfälle (HAW) soll hier ein Überblick über die erforderlichen übertägigen Anlagenteile und über das Ausmaß der notwendigen übertägigen Bebauung gegeben werden. Die Arbeiten dazu finden begleitend zur derzeit laufenden Suche nach einem Standort für die hochradioaktiven Abfälle statt. Den Arbeiten wird derzeit die Annahme zu Grunde gelegt, dass wichtige kerntechnische Anlagen, wie z. B. die Konditionierungsanlage, direkt am Endlagerstandort errichtet werden, um Transporte der Endlagergebinde über öffentliche Verkehrswege zu vermeiden. Übertägig errichtete Anlagen werden im Bergbau als Tagesanlagen bezeichnet. An einem Endlagerstandort werden diese zur Ausführung von vielfältigen und komplexen Prozessen, von der Annahme beladener Transport- und Lagerbehältern über die Konditionierung bis hin zum Transport der Endlagergebinde nach unter Tage, benötigt. Aufgrund der Art der Aufgabe wird dabei hauptsächlich zwischen Anlagen mit kerntechnischen Funktionen und Anlagen mit konventionellen, bergbaulichen Funktionen unterschieden. Bei den kerntechnischen Funktionen handelt es sich z. B. um die Annahme und die Konditionierung (u. a. Umverpackung) der radioaktiven Abfälle sowie die Vorbereitung von Endlagergebinden (dies sind die beladenen Endlagerbehälter) zur Einlagerung unter Tage. Zu den konventionellen Funktionen zählen hingegen z. B. die Durchführung aller rein bergbaulichen Maßnahmen.

Die verschiedenen Anlagen, die zur Ausführung der Prozesse und somit zur Sicherstellung des kontinuierlichen Betriebs eines HAW-Endlagers notwendig sind, bestimmen zu einem großen Teil den Flächenbedarf des übertägigen Betriebsgeländes. Für eine erste Abschätzung des entsprechenden Flächenbedarfs werden die einzelnen Anlagen zunächst zu größeren Anlagenkomplexen zusammengefasst. Dies geschieht separat für ein Gelände kerntechnischer Anlagen und ein Endlagerbergwerksgelände mit den Anlagen mit konventionellen, bergbaulichen Funktionen. Die Schätzungen der Flächenbedarfe werden dabei unter anderem aus den Planungen von Tagesanlagen weiterer Endlager aus dem In- und Ausland abgeleitet.

Zusätzlich zu den Grundflächen der Anlagenkomplexe werden bei der Abschätzung der Fläche des Gesamtbetriebsgeländes Zuschläge für Infrastruktur- und Grünflächen pauschal berücksichtigt. Ebenso geht der Flächenbedarf zur Einfriedung des Betriebsgeländes in die Berechnung mit ein. Darüber hinaus wird ein Außenbereich (z. B. mit Parkplätzen) mit einbezogen. Die Flächenbedarfe für all diese Bereiche können bisher nur als größenorientierende Werte abgeschätzt werden und sind insbesondere in Abhängigkeit vom Standort und dem Endlagerkonzept hochvariabel. Um dieser Variabilität Ausdruck zu verleihen, werden bei diesem Vorgehen Ungewissheiten von ± 50 % angenommen. Auf Grundlage dessen und der Annahme, dass alle aufgeführten Anlagen direkt am Endlagerstandort errichtet werden, wird hier ein Gesamtflächenbedarf für die übertägige Bebauung von 24 ha \pm 12 ha geschätzt, was einer Fläche von circa 34 ± 17 Fußballfeldern entspricht.

Das Nationale Begleitgremium und seine Rolle nach Geologiedatengesetz

M. Scheck-Wenderoth und die Mitglieder des NBG

 $Nationales \ Begleitgremium, \ https://www.nationales-begleitgremium.de$

Key words: Endlagersuche, Geologiedatengesetz, Standortauswahlgesetz

1. Einleitung

Das Nationale Begleitgremium (NBG) ist ein unabhängiges, pluralistisch zusammengesetztes gesellschaftliches Gremium. Wissenschaftler*innen, Studierende, interessierte Bürger*innen - die Bandbreite der Mitglieder spiegelt die Vielfalt der Gesellschaft wider. Ziel ist es, die Endlagersuche für hoch radioaktive Abfälle vermittelnd zu begleiten - unabhängig, transparent und bürgernah. Das NBG besteht aus zwölf anerkannten Persönlichkeiten des öffentlichen Lebens, die von Bundestag und Bundesrat berufen wurden. Zu den anerkannten Persönlichkeiten gehören:

- Prof. Dr. Miranda Schreurs Co-Vorsitzende, Professorin für Umwelt und Klimapolitik, Hochschule für Politik an der TU München, ehemaliges Mitglied im Sachverständigenrat für Umweltfragen
- Prof. Dr. Armin Grunwald Co-Vorsitzender, Leiter des Büros für Technikfolgen-Abschätzung beim Deutschen Bundestag, ehemaliges Mitglied der Endlagerkommission
- Dr. Günther Beckstein, Ministerpräsident a.D. Freistaat Bayern
- Klaus Brunsmeier, Mitglied Bund für Umwelt und Naturschutz Deutschland (BUND), ehemaliges Mitglied der Endlagerkommission
- Dr. Dr. h.c. Markus Dröge, ehemaliger Bischof der Evangelischen Kirche Berlin-Brandenburg schlesische Oberlausitz, Mitglied des Rates der EKD
- Prof. Dr. Rainer Grießhammer, Chemiker, Honorarprofessor an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
- Jo Leinen, ehemaliges Mitglied des Europäischen Parlaments
- Dr. habil. Monika C. M. Müller, Studienleiterin für Naturwissenschaften, Ökologie und Umweltpolitik der Evangelischen Akademie Loccum
- Prof. Dr. Werner Rühm, Leiter der Arbeitsgruppe "Medizin- und Umweltdosimetrie" im Institut für Strahlenmedizin am Helmholtz Zentrum München
- Prof. Dr. Dr. h.c. Roland Sauerbrey, Physiker, ehemaliger Wissenschaftlicher Direktor des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf
- Prof. Dr. Maria-Theresia Schafmeister, Geologin, Lehrstuhl für Angewandte Geologie/Hydrogeologie an der Universität Greifswald
- Prof. Dr. Magdalena Scheck-Wenderoth, Geologin, Direktorin des Departments 4 Geosysteme am Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum

Neben diesen Expertinnen und Experten sind auch sechs Bürger*innen Teil des NBG wobei zwei von ihnen der jungen Generation angehören. Diese werden in einem Beteiligungsverfahren nominiert und von der Bundesumweltministerin ernannt. Als Bürgervertreter*innen benannt sind:

- Marion Durst, Diplompädagogin für Physik, Astronomie und Mathematik
- Lukas Fachtan, Master-Student der Geographie
- Tobias Flieger, Marktforscher mit Schwerpunkt User Experience
- Annette Lindackers, Ingenieurin, Freie Journalistin
- Jorina Suckow, Promotionsstudentin und Diplom-Juristin
- Dr. Manfred Suddendorf, Selbstständiger Unternehmensberater und Dozent

Zurzeit bearbeiten vier Fachgruppen Teilaspekte von im Verfahren der Endlagersuche auftretenden Fragestellungen:

Fachgruppe I Öffentlichkeitsbeteiligung

Die Fachgruppe Öffentlichkeitsbeteiligung im NBG begleitet kritisch die Umsetzung von Partizipationsformaten und entwickelt im Dialog mit den politischen Akteuren und Bürger*innen neue Ideen, um möglichst viele Menschen neugierig auf das Thema Endlagersuche zu machen.

Fachgruppe II Geologie und Grundlagendaten

Die Fachgruppe Geologie und Grundlagendaten begleitet kritisch den Umgang mit geologischen Daten im Verfahren. Sie setzt sich dafür ein, dass dabei auf die größtmögliche Transparenz geachtet wird. Außerdem begleitet und koordiniert sie z.B. die Arbeit der Sachverständigengruppe, die im Namen des NBG, auch jene geologischen Daten einsehen kann, die nicht öffentlich zugänglich sind.

Fachgruppe III Strahlenschutz und Sicherheit

Die Fachgruppe Strahlenschutz und Sicherheit begleitet kritisch Themen der Sicherheit und des Strahlenschutzes innerhalb Verfahrens. Sie achtet darauf, dass die Diskussionen der Wissenschaft berücksichtigt werden und auch die Öffentlichkeit bei der Gestaltung der Sicherheitsaspekte mit einbezogen wird. Dazu gehört insbesondere die Wahrung angemessener Fristen, damit auch jene Personen, die nicht mit Fach- und Hintergrundwissen ausgestattet sind, genügend Zeit haben, sich einzuarbeiten.

Fachgruppe IV Selbsthinterfragendes Verfahren

Die Fachgruppe Selbsthinterfragendes Verfahren befasst sich mit den Aspekten zu dem Thema "Selbschinterfragendes Verfahren" und dem Geflecht der an der Standortauswahl beteiligten Institutionen. Sie wird ihre Arbeit im zweiten Halbjahr 2021 aufnehmen.

Grundlage der Arbeit des NBGs ist das Standortauswahlgesetz (StandAG, ausgefertigt am 5. Mai 2017, § 8 Nationales Begleitgremium) Dieses Gesetz legt das Verfahren und die Kriterien für die Auswahl des Endlagerstandorts fest. Es regelt zudem die Beteiligung der Öffentlichkeit am Verfahren.

Das NBG versteht sich als eine unabhängige gesellschaftliche Instanz - gegenüber Behörden, Parlament, oder der Wirtschaft. Seine Mitglieder dürfen keiner gesetzgebenden Körperschaft oder Regierung des Bundes oder eines Bundeslandes angehören. Zudem dürfen sie keinerlei wirtschaftliche Interessen in Bezug auf Standortauswahl oder die Endlagerung haben. Das Gremium möchte durch Fachwissen und Neutralität Vertrauen vermitteln und schlichtend zwischen verschiedenen Akteuren aktiv werden. Damit will das NBG dazu beitragen, dass in einem transparenten und fairen Auswahlverfahren der bestmögliche Standort für ein Endlager für hoch radioaktive Abfälle gefunden wird.

Das Gremium hat die Möglichkeit sich wissenschaftlich beraten zu lassen. Die Ergebnisse der Beratungen werden öffentlich zur Verfügung gestellt und in den Sitzungen des Gremiums diskutiert.

Die Mitglieder des Gremiums erhalten Einsicht in alle Akten und Unterlagen des Standortauswahlverfahrens des Bundesamtes für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (BASE), das in dem Verfahren als Aufsichts- und Genehmigungsbehörde fungiert. Die Mitglieder des Begleitgremiums erhalten auch Einsicht in alle Akten und Unterlagen des Standortauswahlverfahrens beim Vorhabenträger, bei der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe und den geologischen Diensten. Vorhabenträger im Standortauswahlverfahren ist die neu gegründete Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE).

Das NBG kann sich zudem unabhängig und wissenschaftlich mit sämtlichen Fragen des Standortauswahlverfahrens befassen, die zuständigen Institutionen befragen, Stellungnahmen abgeben und dem Bundestag weiter Empfehlungen zum Standortauswahlverfahren geben. Diese können Änderungs- und Innovationsbedarf bei der Durchführung des Verfahrens aufzeigen und sich zum Beispiel mit Verfahrensmodifikationen und Verfahrensrücksprüngen befassen.

Seine Beratungsergebnisse hat das NBG zu veröffentlichen. Abweichende Voten sind bei der Veröffentlichung von Empfehlungen und Stellungnahmen zu dokumentieren.

Was ist das Geologiedatengesetz?

Das Geologiedatengesetz wurde am 5. Juni 2020 mit der Zustimmung des Bundesrates verabschiedet und trat am 30. Juni 2020 in Kraft. Es unterscheidet zwischen staatlichen und nichtstaatlichen geologischen Daten und unterteilt diese in drei Kategorien. Jede Kategorie hat eigene Fristen, die die öffentliche Bereitstellung regeln.

- 1. Staatliche/nichtstaatliche Nachweisdaten (Informationen u. a. über Ort, Zeitpunkt, Zweck der Untersuchung). Diese werden demnach unverzüglich/spätestens 3 Monate nach Ablauf der Frist zur Übermittlung der Daten an die zuständige Behörde öffentlich bereitgestellt.
- 2. Staatliche/nichtstaatliche Fachdaten (Daten, die durch Messungen und Aufnahmen gewonnen und aufbereitet wurden). Diese sind spätestens 6 Monate nach Abschluss der Untersuchungen/fünf Jahre nach Ablauf der Übermittlungsfrist öffentlich bereit zu stellen. Bei nichtstaatlichen Fachdaten, die im Zuge einer gewerblichen Tätigkeit auf Grund einer Bergbauberechtigung oder anderer Untersuchungen insbesondere zur Gewinnung von Bodenschätzen erhoben wurden, gilt eine Frist von 10 Jahren nach Ablauf der Übermittlungsfrist.
- 3. Staatliche Bewertungsdaten (Daten, die Analysen, Einschätzungen und Schlussfolgerungen zu Fachdaten beinhalten, z. B. in Form von Gutachten, Studien oder Modellen des geologischen Untergrunds). Diese sind spätestens 6 Monate nach Abschluss der Untersuchungen öffentlich bereitzustellen. Für nachträglich angeforderte nichtstaatliche Fachdaten und nichtstaatliche Bewertungsdaten ist grundsätzlich keine öffentliche Bereitstellung vorgesehen.

Zu diesen Vorschriften gibt es jedoch eine ergänzende Regelung in § 34. Diese ermöglicht unter bestimmten Voraussetzungen zum einen eine Verkürzung der Veröffentlichungsfrist bei den nichtstaatlichen Fachdaten. Zum anderen lässt es eine Ausnahme von dem Grundsatz zu, dass nachträglich angeforderte nichtstaatliche Fach- und Bewertungsdaten nicht öffentlich bereitgestellt werden.

Diese Regelung verleiht der BGE die Befugnis, über eine öffentliche Bereitstellung der von ihr im Standortauswahlverfahren benötigten nichtstaatlichen Fach- und Bewertungsdaten zu entscheiden, die (noch) nicht über die anderen Regelungen veröffentlicht werden können. Voraussetzung für diese sog. erweiterte öffentliche Bereitstellung ist, dass sie für die Suche und Auswahl eines Endlagerstandortes erforderlich ist und das öffentliche Interesse an der öffentlichen Bereitstellung gegenüber dem privatrechtlichen Interesse an der Geheimhaltung überwiegt.

Vor einer solchen Entscheidung müssen die Betroffenen, z. B. Privatfirmen, die Inhaber der geologischen Daten sind, angehört werden. Spätestens 30 Jahre nach ihrer Übermittlung werden die für das Standortauswahlverfahren benötigten und entscheidungserheblichen nichtstaatlichen Bewertungsdaten öffentlich bereitgestellt, wenn keine überwiegenden privaten Investitionsinteressen entgegenstehen.

Wichtig ist, dass durch den vom Bundestag und Bundesrat angenommenen Kompromissvorschlag des Vermittlungsausschusses noch eine Ergänzung in § 34 aufgenommen wurde. Die besagt, dass ab der Ermittlung von Standortregionen für die übertägige Erkundung in der Regel davon auszugehen ist, dass die Gründe des Allgemeinwohls für die öffentliche Bereitstellung der geologischen Daten überwiegen (sog. Regelvermutung).

Ein Widerspruch und eine Anfechtungsklage gegen eine solche erweiterte öffentliche Bereitstellung der benötigten und entscheidungserheblichen Daten haben keine aufschiebende Wirkung. Das bedeutet, dass diese geologischen Daten unverzüglich veröffentlicht werden können. Für die betroffenen Privatfirmen ist allerdings ein Eilverfahren vor dem Verwaltungsgericht möglich. Hier wäre dann unter anderem zu prüfen, ob in einem konkreten Einzelfall ein überwiegendes privates Interesse besteht.

Wer darf was veröffentlichen?

Die BGE gewährleistet die öffentliche Bereitstellung der geologischen Daten im Standortauswahlverfahren – es sei denn es ist etwas anderes geregelt oder einvernehmlich vereinbart worden, z. B. dass die Staatlichen Geologischen Dienste der Länder die öffentliche Bereitstellung gewährleisten.

Die BGE macht den Staatlichen Geologischen Diensten einen Vorschlag zur Kategorisierung der geologischen Daten, die ihr bereits vor Inkrafttreten des Gesetzes übermittelt wurden, in Nachweis-, Fach- und Bewertungsdaten. Diesen Kategorisierungsvorschlag überprüfen die Staatlichen Geologischen Dienste innerhalb zweier Monate.

Ein Widerspruch und eine Anfechtungsklage gegen die Entscheidung über die Kategorisierung von geologischen Daten, die im Standortauswahlverfahren benötigt werden und entscheidungserheblich sind, haben keine aufschiebende Wirkung.

Neue Aufgabe für das NBG Trotz der genannten Regelungen zur Schaffung von Transparenz können nach wie vor nicht (sofort) alle geologischen Daten veröffentlicht werden - entweder weil z. B. die Fristen zur Veröffentlichung noch nicht abgelaufen sind oder weil in Einzelfällen z. B. das Interesse eines Unternehmens an der Geheimhaltung der Daten höher eingestuft wird als das öffentliche Interesse an einer Veröffentlichung. In solchen Fällen sollen die Daten von der BGE in einem speziellen Datenraum bereitgestellt werden.

Zugriff darauf haben die Mitglieder des NBG und bis zu fünf von diesem beauftragte externe Sachverständige. Diese können die Daten einsehen, bewerten und in Gutachten Stellung dazu nehmen, ob diese Daten im Standortauswahlverfahren zutreffend bewertet und sachgerecht berücksichtigt worden sind.

Was sagt das NBG dazu?

Mit dem Geologiedatengesetz (GeolDG) wird endlich die Voraussetzung geschaffen, dass ein großer Teil der geologischen Daten, die im Standortauswahlverfahren benötigt werden und entscheidungserheblich sind, nun veröffentlicht werden kann. Das ist der positive Effekt. Leider betrifft dies jedoch nicht alle Daten, wofür sich das NBG von Anfang an eingesetzt hat. Für Nachvollziehbarkeit und Glaubwürdigkeit des Verfahrens wäre volle Transparenz besser.

Diese verbleibende Transparenzlücke soll nun das NBG überbrücken, in dem es Sachverständige einsetzt, die unter Verschluss befindliche Daten einsehen und bewerten sollen (nach § 35 GeolDG). Dadurch wird dem NBG nicht nur eine neue Aufgabe zugewiesen, sondern es verschiebt sich auch seine Rolle im Gefüge. Die Gremienmitglieder betrachten das mit Skepsis. Langfristig müssen im Sinne eines transparenten Verfahrens alle Daten öffentlich bereitgestellt werde. Auf der Website des NBG sind bereits folgende Gutachten einsehbar:

- Gutachten zur Anwendung der §§ 22-24 Standortauswahlgesetz für Standorte mit Wirtsgestein Tonstein anhand von Akteneinsicht bei der Bundesgesellschaft für Endlagerung (Prof. Dr. Randolf Rausch)
- Gutachten zur Anwendung der §§ 22-24 Standortauswahlgesetz für Standorte mit Wirtsgestein Kristallingestein anhand von Akteneinsicht bei der Bundesgesellschaft für Endlagerung (Dr. Florian Fusseis)
- Gutachten zur Anwendung der §§ 22-24 Standortauswahlgesetz für die Standorte Gorleben und Waddekath (Wirtsgestein Steinsalz in steiler Lagerung) anhand von Akteneinsicht bei der Bundesgesellschaft für Endlagerung (Prof. Dr. Randolf Rausch).
- Gutachten zur Prüfung des aktuellen Standes des Ausschlusskriteriums "seismische Aktivität laut § 22 Abs. 2 Nr. 4 Standortauswahlgesetz (Prof. Dr. Friedemann Wenzel).
- Gutachten zur Prüfung des aktuellen Standes des Ausschlusskriteriums "vulkanische Aktivität" laut § 22 Abs. 2 Nr. 5 Standortauswahlgesetz (Dr. Jochen Zemke).

- [1] https://www.nationales-begleitgremium.de
- $[2] \ \, Standortaus wahlge setz$
- [3] Geologiedatengesetz

Vorschau auf die auf die Ermittlung von Standortregionen für die übertägige Erkundung im Schritt 2 der Phase I des Standortauswahlverfahrens (§ 14 StandAG)

W. Rühaak, M. Bjorge, F. Panitz und das Team der Standortauswahl BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH

 ${\it Key\ words:}\quad {\it Standortaus wahlverfahren,\ Sicherheitsuntersuchungen}$

1. Ablauf des Standortauswahlverfahrens

Das im Standortauswahlgesetz (StandAG) [7] geregelte Suchverfahren nach einem Endlager für hochradioaktive Abfälle in Deutschland (Standortauswahlverfahren) läuft in insgesamt drei Phasen ab. Der Ermittlung von Teilgebieten und nachfolgend Standortregionen für die übertägige Erkundung (Phase I), der übertägigen Erkundung der Standortregionen (Phase II) und der untertägigen Erkundung der in Frage kommenden Standorte (Phase III), siehe auch Abbildung 1. Der im September 2020 von der Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE) vorgestellte Zwischenbericht Teilgebiete [1] stellt dabei das Ergebnis von Phase I Schritt 1 dar, in dem zunächst Gebiete ermittelt wurden, die eine günstige geologische Gesamtsituation für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle erwarten lassen (Teilgebiete). Die Ermittlung von Teilgebieten erfolgte unter Anwendung der im StandAG [7] festgelegten Ausschlusskriterien (AK) [2], Mindestanforderungen (MA) [3] und geowissenschaftlichen Abwägungskriterien (geoWK) [4]. Insgesamt wurden 90 Teilgebiete ermittelt, davon 74 im Wirtsgestein Steinsalz, 9 im Wirtsgestein Tongestein und 7 im kristallinen Wirtsgestein. Zusammen bedecken diese ca. 54 % der Landesfläche Deutschlands.

Um aus den Teilgebieten Standortregionen für die übertägige Erkundung zu ermitteln sind gemäß § 14 StandAG [7] im zweiten Schritt der Phase I des Standortauswahlverfahrens repräsentative vorläufige Sicherheitsuntersuchungen (rvSU) nach § 27 StandAG [7] durchzuführen, anschließend wieder die geowissenschaftlichen Abwägungskriterien (geoWK) nach § 24 StandAG [7] anzuwenden und die planungswissenschaftlichen Abwägungskriterien (planWK) nach Maßgabe von § 25 StandAG [7] heranzuziehen.



Figure 1: Schematische Übersicht des Ablaufs des Standortauswahlverfahrens. Die Ermittlung von Standortregionen für die übertägige Erkundung stellt das Ergebnis von Phase I Schritt 2 dar.

Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021

2. Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen

Im gesamten Standortauswahlverfahren sind insgesamt dreimal vorläufige Sicherheitsuntersuchungen (vSU) durchzuführen, wobei deren Detaillierungsgrad mit der Zeit jeweils zunimmt. Erstmals sind vSU im Rahmen von § 14 StandAG [7] in Form der bereits erwähnten rvSU durchzuführen. Nach § 27 Abs. 1 StandAG [7] dienen die vSU zur Bewertung, "[...] inwieweit der sichere Einschluss der radioaktiven Abfälle unter Ausnutzung der geologischen Standortgegebenheiten erwartet werden kann". Die Anforderungen an die Durchführung der vSU sind in der Verordnung über Sicherheitsanforderungen und vorläufige Sicherheitsuntersuchungen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle [6] geregelt. Dabei sind in Artikel 1, der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung (EndlSiAnfV), die genauen Anforderungen an die Sicherheit eines Endlagers definiert und in Artikel 2, der Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung (EndlSiUntV), die konkreten Bestimmungen zur Umsetzung der vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen festgelegt. Gemäß EndlSiUntV sind für die rvSU die folgenden Arbeitsschritte durchzuführen (siehe auch Abbildung 2):

- (1) Untersuchungsräume ausweisen (§ 3 EndlSiUntV [6])
- (2) Geosynthese erstellen (§ 5 EndlSiUntV [6])
- (3) Vorläufiges Sicherheitskonzept erstellen (§ 6 EndlSiUntV [6])
- (4) Vorläufige Auslegung des Endlagers entwickeln (§ 6 EndlSiUntV [6])
- (5) Optimierung des Endlagersystems (§ 6 EndlSiUntV [6])
- (6) Analyse des Endlagersystems (§ 7 EndlSiUntV [6])
- (7) Bewertung des Endlagersystems (§ 10 EndlSiUntV [6])
- (8) Bewertung von Ungewissheiten (§ 11 EndlSiUntV [6])
- (9) Ableitung des Erkundungs-, Forschungs- und Entwicklungsbedarfs (§ 12 EndlSiUntV [6])

Nach § 3 der EndlSiUntV [6] sind zu Beginn der rvSU für jedes Teilgebiet zunächst einer oder mehrere Untersuchungsräume auszuweisen. Diese bezeichnen Areale, welche in Hinblick auf ihre Eignung als potenzieller Endlagerstandort bewertet werden sollen. Jedes Teilgebiet muss mindestens einen Untersuchungsraum umfassen, kann im Falle sich überlagernder Wirtsgesteine oder der Untersuchung verschiedener vorläufiger Sicherheitskonzepte aber auch mehrere Untersuchungsräume enthalten. Bei der Ausweisung der Untersuchungsräume muss sichergestellt sein, dass alle Teilgebiete räumlich vollständig durch Untersuchungsräume abgedeckt sind. Die Untersuchungsräume müssen, wenn erforderlich, sinnvoll in kleinere (abdeckende) Räume in einem Teilgebiet aufgeteilt werden.



Figure 2: Übersicht der Arbeitsschritte zur Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen gemäß Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung (EndlSiUntV) [6].

Für jeden Untersuchungsraum ist entsprechend der Vorgaben der EndlSiUntV [6] eine rvSU durchzuführen und in einem Bericht darzustellen. Für jeden Untersuchungsraum ist eine Geosynthese anzufertigen. Diese umfasst sämtliche sicherheitsrelevanten geowissenschaftlichen Informationen sowie deren Interpretation und dient der genauen Darstellung der geologischen Situation innerhalb eines Untersuchungsraums. Für die Geosynthese genutzte Erkenntnisse, welche außerhalb des Untersuchungsraums gewonnen wurden, sind entsprechend kenntlich zu machen und einzuordnen. Inhalte der Geosynthese können u.a. die geologische Beschreibung des Untersuchungsraumes sowie Parameterzusammenstellungen und geologische 3D-Modelle sein.

Für jeden Untersuchungsraum ist nach § 6 der EndlSiUntV [6] neben der Geosynthese ein vorläufiges Sicherheitskonzept gemäß den Anforderungen in § 10 der EndlSiAnfV [6] zu erstellen, das im Laufe des Verfahrens weiterentwickelt werden soll. Aus diesem vorläufigen Konzept wird eine vorläufige Endlagerauslegung abgeleitet. Vereinfachend beinhaltet diese für die rvSU eine Darstellung der wesentlichen und weiteren Barrieren, die Dimensionen eines möglichen Endlagerbergwerkes, die vorgesehene Einlagerungsart, denkbare Maßnahmen zur Rückholbarkeit eingelagerter Abfälle, einen Überblick über potenzielle Verschluss- und Versatzmaßnamen sowie Handlungsempfehlungen zum Schutz der wesentlichen Barrieren von der Erkundung bis zur Stilllegungsphase. Darüber hinaus ist das Endlagersystem zu optimieren und der Einfluss auf die vorläufige Auslegung des Endlagers darzustellen.

Gemäß § 7 der EndlSiUntV [6] ist das Endlagersystem zu analysieren. In dieser Analyse wird die Sicherheit und Robustheit des Endlagersystems ermittelt. Im Gegensatz zu vSU in späteren Phasen des Standortauswahlverfahrens, ist dabei bei den rvSU eine vereinfachte Herangehensweise zu wählen. Wesentliche Inhalte der Analyse des Endlagersystems in den rvSU sind die Ableitung zu erwartender und abweichender Entwicklungen, grundlegende Ausführungen zur betrieblichen Sicherheit sowie die Bewertung der räumlichen Charakterisierbarkeit und der thermischen Verhältnisse des Endlagersystems, der Langzeitstabilität der Geologie, des Flächenbedarfs eines Endlagerbergwerkes und der Perspektive zur Realisierung eines einschlusswirksamen Gebirgsbereichs. Zusätzlich ist der sichere Einschluss der Radionuklide nach den Vorgaben in § 4 der EndlSiAnfV [6] zu bewerten. Ebenfalls Teil der Analyse des Endlagersystems ist eine untersuchungsraumspezifische Auseinandersetzung mit den geoWK, welche entsprechend §14 StandAG [7] im Anschluss an die Durchführung der rvSU erneut anzuwenden sind. Des Weiteren ist das Volumen der jeweils vorhandenen Wirtsgesteine vor dem Hintergrund einer möglichen zusätzlichen Endlagerung schwach und mittelradioaktiver Abfälle zu bewerten.

Nach der Analyse erfolgt die umfassende Bewertung des Endlagersystems nach § 10 der EndlSiUntV [6]. Basierend auf der Analyse des Endlagersystems und unter Einbeziehung des vorläufigen Sicherheitskonzepts sind in der umfassenden Bewertung sowohl die Sicherheit, als auch die Robustheit des Endlagersystems speziell in Hinblick auf die Sicherheit des Einschlusses nach § 4 der EndlSiAnfV [6] zusammenfassend zu beurteilen.

Neben der umfassenden Bewertung des Endlagersystems erfolgt im Rahmen der rvSU außerdem eine Bewertung bestehender Ungewissheiten gemäß § 11 EndlSiUntV [6]. Dazu ist eine systematische Identifizierung und Charakterisierung aller auftretenden Ungewissheiten notwendig. Sinnvoll ist daher, sich bereits während den einzelnen Arbeitsschritten der rvSU mit den jeweils vorhandenen Ungewissheiten auseinanderzusetzen. Auch mögliche Konsequenzen bestehender Ungewissheiten speziell in Bezug auf sicherheitsrelevante Fragestellungen müssen Gegenstand der Betrachtung sein. Basierend darauf ist darzustellen, ob und inwieweit Erkenntnisgewinne, beispielsweise durch Erkundungs und Forschungsarbeiten, zu einer Reduzierung von Ungewissheiten führen können.

Den letzten Aspekt der rvSU bildet die Ableitung des Erkundungs , Forschungs und Entwicklungsbedarfs nach § 12 der EndlSiUntV [6]. Basierend auf den vorangegangenen Arbeiten sind in diesem Arbeitsschritt für jeden Untersuchungsraum sowohl Erkundungs , als auch Forschungs und Entwicklungsbedarfe zusammenzustellen und unter Gesichtspunkten der Endlagersicherheit zu systematisieren. Auch die voraussichtliche Bearbeitungsdauer ist darzulegen.

3. Anwendung der geoWK

Nach der Durchführung der rvSU sind gemäß § 14 StandAG [7] zur weiteren Einengung von Gebieten und somit schließlich der Ermittlung von Standortregionen für die übertägige Erkundung erneut die geoWK nach § 24 StandAG [7] anzuwenden. Im Gegensatz zur erstmaligen Anwendung der geoWK zur Ermittlung von Teilgebieten, sind die geoWK in Phase I Schritt 2 des Verfahrens jedoch nicht auf identifizierte Gebiete, sondern auf diejenigen Untersuchungsräume anzuwenden, die nach Durchführung der rvSU im Ergebnis den sicheren Einschluss hochradioaktiver Abfälle potentiell erwarten lassen. Aufgrund des hohen Detaillierungsgrad der geoWK konnten im ersten Schritt (Teilgebiete) nur wenige Kriterien bzw. Indikatoren tatsächlich gebietsspezifisch bewertet werden. Inwieweit weitere Kriterien und Indikatoren im nächsten Schritt spezifisch für die jeweiligen Untersuchungsräume bewertet werden können, ist zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch nicht absehbar. Geowissenschaftliche Informationen zu den geoWK können beispielsweise über zusätzliche Abfragen bei den zuständigen Bundes und Landesbehörden sowie gezielte Literaturrecherchen zu den Teilgebieten gewonnen werden.

4. Anwendung der planungswissenschaftlichen Abwägungskriterien (planWK)

In Schritt 2 der Phase 1 des Standortauswahlverfahrens sind erstmals die planWK nach Maßgabe von § 25 StandAG [7] anzuwenden. Diese dienen vorrangig der Einengung großer geeignet erscheinender Gebiete, sofern eine weitere Einengung durch AK, MA oder geoWK und der Ergebnisse aus den vSU nicht möglich ist. Darüber hinaus können sie auch zu einem Vergleich von unter Gesichtspunkten der Endlagersicherheit gleichwertigen Gebieten herangezogen werden. Ergebnis der Durchführung der rvSU sowie der erneuten Anwendung der geoWK und nach Maßgabe von § 25 StandAG [7] der planWK stehen Vorschläge für Standortregionen für die übertägige Erkundung, welche nach Festlegung durch den Bundesgesetzgeber den Ausgangspunkt für die Phase II des Standortauswahlverfahrens darstellen.

5. Zusammenfassung und Ausblick

Zur Ermittlung von Standortregionen für die übertägige Erkundung sind in Phase I Schritt 2 zunächst rvSU gemäß den Vorgaben der Verordnung über Sicherheitsanforderungen und vorläufige Sicherheitsuntersuchungen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle [6] durchzuführen, anschließend erneut die geoWK anzuwenden und letztlich nach Maßgabe von §25 StandAG[7] die planWK zu nutzen. Die Durchführung der rvSU gliedert sich dabei entsprechend der EndlSiUntV [6] in mehrere Einzelschritte, die für jeden Untersuchungsraum durchzuführen sind. Initial zur Durchführung von rvSU ist daher die Ausweisung von Untersuchungsräumen, von denen pro Teilgebiet mehrere möglich sind, diese aber insgesamt vollständig abdecken müssen. Ergebnis der rvSU sind nach gegenwärtigem Stand eine Menge von Untersuchungsräumen, auf die dann erneut die geoWK angewendet werden. Die hier skizzierte Vorgehensweise wird bei Durchführung der einzelnen Arbeitsschritte jeweils weiter konkretisieret werden. Es ist geplant die jeweiligen Methoden im Rahmen von Online-Konsultationen zur Diskussion zu stellen.

- [1] BGE (2020): Zwischenbericht Teilgebiete. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH.
- BGE (2020): Anwendung Ausschlusskriterien gemäß § 22 StandAG. Untersetzende Unterlage zum Zwischenbericht Teilgebiete. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH.
- BGE (2020): Anwendung Mindestanforderungen gemäß § 23 StandAG. Untersetzende Unterlage zum Zwischenbericht Teilgebiete. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH.
- [4] BGE (2020): Teilgebiete und Anwendung Geowissenschaftliche Abwägungskriterien gemäß § 24 StandAG. Untersetzende Unterlage zum Zwischenbericht Teilgebiete. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH.
- [5] BGE (2020): Referenzdatensätze zur Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien im Rahmen von § 13 StandAG - Grundlagen. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE).
- [6] BMU (2020): Verordnung über Sicherheitsanforderungen und vorläufige Sicherheitsuntersuchungen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle vom 6. Oktober 2020.
- [7] StandAG: Standortauswahlgesetz vom 5. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), das zuletzt durch Artikel 247 der Verordnung vom 19. Juni 2020 (BGBl. I S. 1328) geändert worden ist.

Vorstellung der Planungen zu Forschung- & Entwicklungsvorhaben in der Standortauswahl

Astrid Göbel und das Team der Standortauswahl BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH

Key words: -

Beitrag lag der Redaktion zum Zeitpunkt des Redaktionsschlusses noch nicht vor.

Ermittlung von Teilgebieten im Schritt 1 der Phase I des Standortauswahlverfahrens

S. Reiche und das Team der Standwortauswahl BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH

Key words: Standortauswahlverfahren, Teilgebiete

1. Einleitung

Das im Standortauswahlgesetz (StandAG) [1] geregelte Suchverfahren nach einem Endlagerstandort für hochradioaktive Abfälle in Deutschland ist in drei Phasen gegliedert. Auf die Ermittlung von Teilgebieten (Schritt 1 der Phase I) und Standortregionen (Schritt 2 der Phase I), folgt die übertägige Erkundung der Standortregionen (Phase II) und schließlich die untertägige Erkundung der in Frage kommenden Standorte (Phase III). Der im September 2020 von der Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE) vorgestellte Zwischenbericht Teilgebiete [2] stellt dabei das Ergebnis des ersten Schrittes von Phase I dar. Die dort ausgewiesenen Teilgebiete stellen nach Anwendung der im StandAG festgelegten Ausschlusskriterien [3], Mindestanforderungen [4] und geowissenschaftlichen Abwägungskriterien [5] jene Gebiete dar, welche günstige geologische Voraussetzungen für die sichere Endlagerung radioaktiver Abfälle erwarten lassen. Insgesamt wurden 90 Teilgebiete ermittelt, davon 74 im Wirtsgestein Steinsalz, 9 im Wirtsgestein Tongestein und 7 im kristallinen Wirtsgestein. Zusammen bedecken diese ca. 54 % der Landesfläche Deutschlands (siehe Abbildung 1). Im Folgenden werden die fachlichen Grundlagen und Herausforderungen für die Ermittlung der Teilgebiete erläutert.



Figure 1: Verbreitungskarte der Teilgebiete gemäß § 13 StandAG.

Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021

2. Ausschlusskriterien

Das Standortauswahlverfahren startet mit einer "weißen Landkarte" Deutschlands. Das heißt für die Suche nach dem Standort mit der bestmöglichen Sicherheit für den dauerhaften Schutz von Mensch und Umwelt vor ionisierender Strahlung und sonstigen schädlichen Wirkungen dieser Abfälle für einen Zeitraum von einer Million Jahren wird die gesamte Bundesrepublik Deutschland ohne Vorfestlegungen und nach den gleichen geowissenschaftlichen Kriterien und Anforderungen bewertet. Zu einer ersten Eingrenzung im Zuge der Ermittlung von Teilgebieten führt die Anwendung der sechs in § 22 StandAG definierten Ausschlusskriterien: großräumige Vertikalbewegungen, aktive Störungszonen, bergbauliche Tätigkeiten, seismische Aktivität, vulkanische Aktivität und Grundwasseralter. Sobald eines dieser Ausschlusskriterien greift, ist das Gebiet nicht mehr als Endlagerstandort geeignet. Die Ausschlusskriterien werden bundesweit und unabhängig voneinander angewendet. Die Daten, die zur Anwendung der Ausschlusskriterien genutzt werden, sind im Rahmen von zwei Datenabfragen im August 2017 sowie Februar 2018 bei den Bundes- und Landesbehörden abgefragt worden. Im Folgenden werden die Ausschlusskriterien gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 1 bis 6 StandAG und deren Anwendung erläutert.

Gebiete sind gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 1 StandAG nicht als Endlagerstandort geeignet, wenn großräumige geogene Hebungen im Mittel von mehr als 1 mm pro Jahr über den Nachweiszeitraum von einer Million Jahren zu erwarten sind. Mögliche Auslöser für isostatische Ausgleichsbewegungen sind Mächtigkeitsänderungen der Erdkruste bei gebirgsbildenden Prozessen oder Massenänderungen an der Erdoberfläche durch Erosion und Vergletscherung [6]. Auf Basis der aktuellen Datengrundlage und dem derzeitigen geologischen Prozessverständnis geht die BGE unter Einbeziehung der Ergebnisse von [7] davon aus, dass Hebungsbeträge von mehr als 1 mm pro Jahr für den Nachweiszeitraum von einer Million Jahre in Deutschland nicht zu erwarten sind [3].

Ein Gebiet kommt gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 2 StandAG nicht als Endlagerstandort in Betracht, wenn aktive Störungszonen vorhanden sind. Der BGE wurden von den Landes- und Bundesbehörden ca. 600.000 Störungssegmente übermittelt. Davon hat die BGE 46.338 Störungssegmente als aktiv im Sinne der im Standortauswahlgesetz aufgeführten Definition einer Bewegung während der letzten 34 Million Jahren klassifiziert. Ausgeschlossene Gebiete ergeben sich aus einem pauschalen Sicherheitsabstand von 1 km um die als aktiv klassifizierte Störungsflächen. Eine grundlegende Herausforderung bei der Anwendung dieses Ausschlusskriteriums war eine einheitliche Bewertung der Störungsaktivität aufgrund der bundesweit sehr unterschiedlichen Datengrundlagen. So ist zum Beispiel die neotektonische Aktivität von Störungszonen in Beckensystemen, in denen junge Sedimente abgelagert wurden, gut ermittelbar. In einem großen Teil der Mittelgebirge sind post-eozäne Gesteine jedoch nicht flächendeckend aufgeschlossen. In diesen Regionen kann die neotektonische Aktivität nur eingeschränkt durch geomorphologische Methoden, rezente Seismizität oder vereinzelt durch direkte radiometrische Datierung erkannt werden. Neben neotektonischen Störungen wurden gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 2 StandAG auch atektonische Vorgänge in einer Tiefe > 300 m u. GOK ausgeschlossen, z. B. Impaktereignisse und Verkarstungen.

Gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 3 StandAG sind Gebiete mit negativen Einflüssen durch gegenwärtige oder frühere bergbauliche Tätigkeiten auszuschließen. Von den Landes- und Bundesbehörden wurden Daten von insgesamt 48.549 Bohrungen mit einer Endteufe > 275 m an die BGE übermittelt. Die Anwendungsmethode sieht vor, um den Bohrpfad dieser Bohrungen einen Sicherheitsabstand mit einem Radius von 25 m anzulegen. Dieser soll sowohl mögliche Lageungenauigkeiten der Bohrung berücksichtigen, als auch eine potentielle Schädigung des angrenzenden Gesteins erfassen. Weitere bergbauliche Tätigkeiten die gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 3 StandAG ausgeschlossen werden sind Tagebau (übertägig) und Tiefbau (untertägig) einschließlich Kavernenspeicher [8]. Zur Ermittlung ausgeschlossener Gebiete wurden Angaben der maximalen Teufe (z. B. tiefste Sohle) sowie die Umgrenzung des an die Oberfläche projizierten Grubengebäudes einschließlich dessen Einwirkungsbereich auf das umliegende Gebirge verwendet [3].

Ein Gebiet kommt gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 4 StandAG nicht als Endlagerstandort in Betracht, wenn die örtliche seismische Gefährdung größer ist als in Erdbebenzone 1 nach DIN EN 1998-1/NA 2011-01. Insgesamt konnten anhand dieses Ausschlusskriteriums fünf ausgeschlossene Gebiete mit einer Fläche

zwischen jeweils 130 km² und 5.500 km² ermittelt werden [3]. Auf Grundlage einer Neueinschätzung der Erdbebengefährdung Deutschlands [9] befindet sich der Nationale Anhang der DIN EN 1998-1 aktuell in einem Überarbeitungsverfahren.

Ein Gebiet ist gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 5 StandAG nicht als Endlagerstandort geeignet, wenn quartärer Vulkanismus vorliegt oder zukünftig vulkanische Aktivität über den Nachweiszeitraum von einer Million Jahren zu erwarten ist. Gebiete quartärer sowie wahrscheinlich eintretender zukünftiger vulkanischer Aktivität befinden sich in der Eifel und in der Region Vogtland-Oberpfalz [10]. Dort hat die BGE ausgeschlossene Gebiete auf Basis einer Zusammenstellung sämtlicher bekannten quartären Eruptionszentren inkl. eines Sicherheitsabstands von 10 km um jedes Eruptionszentrum ermittelt [3].

Ein Gebiet ist gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 6 StandAG nicht als Endlagerstandort geeignet, wenn in Gebirgsbereichen, die als ewG (einschlusswirksamer Gebirgsbereich) oder Einlagerungsbereich in Betracht kommen, junge Grundwässer nachweisbar sind. Grundwässer gelten als jung, wenn ein unmittelbarer Austausch mit der Erdoberfläche besteht und Spuren der radioaktiven Isotope Tritium (³H) und Kohlenstoff-14 (¹⁴C) nachweisbar sind. Im Ergebnis werden insgesamt 58 Probeentnahmepunkte und 96 Probeentnahmebereiche mit jungem Grundwasser ermittelt. Diese können in allen Fällen mit ausgeschlossenen Gebieten um Bohrungen korreliert werden, weshalb im Schritt 1 der Phase I kein zusätzlicher Ausschluss erfolgt [3].

3. Mindestanforderungen

3.1. Begriffsbestimmungen der Wirtsgesteine

Gemäß § 1 Abs. 3 StandAG kommen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland grundsätzlich die Wirtsgesteine Steinsalz, Tongestein und Kristallingestein in Betracht. Zur Ermittlung von Teilgebieten wurden die drei Gesteinstypen folgendermaßen bestimmt:

Tongesteine sind klastische Sedimentgesteine, die sehr geringe Korngrößen aufweisen (< 0,002 mm) und überwiegend aus Tonmineralen (z.B. Illite oder Kaolinitgruppen-Minerale) aufgebaut sind. Die BGE subsumiert unter dem Wirtsgesteinsbegriff Tongestein sowohl plastische Tone als auch diagenetisch verfestigte Tongesteine. Tongesteinsformationen und Tongesteinsabfolgen bestehen überwiegend aus Tongesteinen; können aber untergeordnet auch andere Gesteine, wie z.B. Sandsteine oder Karbonatgesteine enthalten. Tongesteinsformationen werden somit nicht ausschließlich durch Tongesteine charakterisiert; eingeschlossen werden damit auch Ton-dominierte Vertreter aus der kontinuierlichen Reihe Kalkstein-Mergel-Tongestein.

Die BGE definiert zwei Gesteinsgruppen als kristalline Wirtsgesteine: Plutonite und hochgradig regionalmetamorphe Gesteine. Plutonite sind grobkörnige (mit phaneritischem Gefüge) magmatische Gesteine, die in der Erdkruste aus teilgeschmolzenem Magmen auskristallisiert sind. Sie gelangen durch tektonische Prozesse und Denudation an die Erdoberfläche. Hochgradig regionalmetamorphe Gesteine sind Metamorphite, die über die Druck- und Temperaturbedingungen ihrer metamorphen Entstehung definiert werden. Dies sind metamorpher Gesteine der Mineralfazies Amphibolit, Eklogit und Granulit.

Steinsalz ist ein chemisches Sedimentgestein, das durch Ausfällung aus Meer- oder mineralreichem Grundwasser entstanden ist. Sein gesteinsbildender Hauptbestandteil ist das Mineral Halit. Salzformationen sind ursprünglich horizontal, d. h. stratiform, abgelagert worden. Salzstrukturen, bei denen die Deckgebirgsschichten infolge eines Salzaufstiegs durchbrochen wurden, werden als Steinsalz in steiler Lagerung bezeichnet.

3.2. Anwendung der Mindestanforderungen

Die Anwendung der Mindestanforderungen gemäß § 23 StandAG, beinhaltet die Überprüfung der Gebirgsdurchlässigkeit, Mächtigkeit des ewG, minimalen Teufe des ewG und Fläche des Endlagers sowie den Erhalt der Barrierewirkung. Ziel ist die Ermittlung von identifizierten Gebieten – Gebiete, in denen kein Ausschlusskriterium greift und alle Mindestanforderungen erfüllt sind.

Der erste Arbeitsschritt im Zusammenhang mit der Anwendung der Mindestanforderung bestand in der Ermittlung und Inventarisierung von stratigraphischen Einheiten in Deutschland, welche die Wirtsgesteine Tongestein, Steinsalz und kristallines Wirtsgestein enthalten. Maßstab für die Beurteilung waren insbesondere die Gebirgsdurchlässigkeit und Kenntnisse über den Erhalt der Barrierewirkung. Für stratigraphische Einheiten, die Wirtsgesteine enthalten, deren Mächtigkeit aber aufgrund der Datenlage und Angaben in der Fachliteratur deutlich geringer als 100 m ist, gelten die Mindestanforderungen als nicht erfüllt. Liegen für die Anwendung der Mindestanforderungen notwendige Daten erst in einer späteren Phase des Standortauswahlverfahrens vor, gilt die jeweilige Mindestanforderung als erfüllt, soweit dies auf Grund der vorhandenen Datenlage zu erwarten ist (§ 23 Abs. 3 StandAG).

Zur Anwendung der Mindestanforderungen auf die im Rahmen der Inventarisierung erfassten stratigraphischen Einheiten werden, wenn verfügbar, die von Landes- und Bundesbehörden übermittelten geologischen 3D-Modellen verwendet. Für die Gebiete in Deutschland, in denen kein geologisches 3D-Modell zur Verfügung steht, erfolgt die Bearbeitung auf Basis von thematischen Karten, Schichtenverzeichnissen sowie Fachliteratur. Mit Hilfe dieser Informationen wird gebietsspezifisch geprüft, ob Wirtsgesteine vorliegen und diese hinsichtlich Mächtigkeit, Tiefenlage und Flächenbedarf die Mindestanforderungen erfüllen. Eine lithologische Abgrenzung von Wirtsgesteinen innerhalb der stratigraphischen Einheiten war auf Basis der bereitgestellten geologischen 3D-Modelle im Schritt 1 der Phase 1 nicht möglich. Die 3D-Modelle und auch die thematischen Karten erreichen in der Regel maximal die (globale) Hierarchie-Ebene der Serie bzw. Epoche oder in einzelnen Fällen die (regionale) lithostratigraphische Hierarchie-Ebene der Gruppe oder Formation. Die im Rahmen der Inventarisierung ermittelten Wirtsgesteinsabfolgen reichen in der Hierarchie-Ebene häufig tiefer. Für die Bearbeitung der Mindestanforderungen bedeutet dies zunächst, dass in den geologischen 3D-Modellen oder auch thematischen Karten zwar die stratigraphische Einheit mit einer Wirtsgesteinsabfolge ausgewiesen, die Abfolge selbst jedoch auf Basis der bestehenden Daten nicht im Detail abgegrenzt werden kann.

Im Ergebnis der Anwendungen der Mindestanforderungen wurden insgesamt 181 identifizierte Gebiete ermittelt [4].

4. Geowissenschaftliche Abwägungskriterien

Im letzten Arbeitsschritt zur Ermittlung der Teilgebiete, wendet die BGE auf die identifizierten Gebiete die geowissenschaftlichen Abwägungskriterien gemäß § 24 StandAG an [5]. Die geowissenschaftlichen Abwägungskriterien umfassen insgesamt elf Kriterien mit den dazugehörigen bewertungsrelevanten Eigenschaften sowie den Bewertungsgrößen bzw. Indikatoren:

- (1) Kriterium zur Bewertung des Transportes radioaktiver Stoffe durch Grundwasserbewegungen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich
- (2) Kriterium zur Bewertung der Konfiguration der Gesteinskörper
- (3) Kriterium zur Bewertung der räumlichen Charakterisierbarkeit
- (4) Kriterium zur Bewertung der langfristigen Stabilität der günstigen Verhältnisse
- (5) Kriterium zur Bewertung der günstigen gebirgsmechanischen Eigenschaften
- (6) Kriterium zur Bewertung der Neigung zur Bildung von Fluidwegsamkeiten
- (7) Kriterium zur Bewertung der Gasbildung
- (8) Kriterium zur Bewertung der Temperaturverträglichkeit
- (9) Kriterium zur Bewertung des Rückhaltevermögens im einschlusswirksamen Gebirgsbereich
- (10) Kriterium zur Bewertung der hydrochemischen Verhältnisse
- (11) Kriterium zur Bewertung des Schutzes des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs durch das Deckgebirge

Die Einordnung der Indikatoren erfolgt, soweit im StandAG vorgegeben, jeweils in die Wertungsgruppen "günstig", "bedingt günstig" und "weniger günstig" (bzw. "ungünstig"). Die zusammenfassende Bewertung für jedes identifizierte Gebiet erfolgt im Zuge einer Abwägung der Ergebnisse zu allen Abwägungskriterien. Dabei ist ein einzelnes Abwägungskriterium nicht hinreichend, um die günstige geologische Gesamtsituation nachzuweisen oder auszuschließen. Die Daten zu den geowissenschaftlichen Abwägungskriterien wurden bei den zuständigen Landes- und Bundesbehörden im August 2019 abgefragt. Im Laufe des Jahres 2020 erfolgten weiterführende Datenabfragen, z. B. zu Erosionsstrukturen oder dem Internbau von Salzstrukturen [5]. Zum jetzigen Zeitpunkt des Standortauswahlverfahrens liegen gebietsspezifische Informationen nicht für die Bewertung sämtlicher Kriterien vor, sodass zur Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien im Rahmen von § 13 StandAG für einen Großteil der Kriterien Referenzdatensätze [11] verwendet wurden. Diese Referenzdatensätze enthalten wirtsgesteinsspezifische Zusammenstellungen von Literaturwerten der für die Bewertung der Indikatoren benötigten Eigenschaften und ermöglichen eine Bewertung der jeweiligen Kriterien.

Eine Bewertung der Kriterien aus Anlage 2 und 11 (zu § 24 StandAG) erfolgt für alle Wirtsgesteine individuell auf Basis gebietsspezifischer Daten, welche aus den BGE-internen Modellierprotokollen [4] und geologischen 3D-Modellen gewonnen werden. Ferner wurden Informationen zur Lage der Quartärbasis, zu Störungen sowie atektonischen Vorgängen für die Bewertung herangezogen. Für das Kriterium aus Anlage 3 kann mit Ausnahme der identifizierten Gebiete im kristallinen Wirtsgestein ebenfalls eine individuelle Bewertung auf Basis gebietsspezifischer Daten stattfinden. Als Datengrundlage für diese Anlage dienen ebenfalls Modellierprotokolle und Fachliteratur, z. B. [12] für Informationen zum Internbautyp von Salzstrukturen. Für das Kriterium aus Anlage 4 erfolgt eine individuelle Bewertung auf Basis gebietsspezifischer Daten aus Modellierprotokollen und Fachliteratur in den Wirtsgesteinen Tongestein und in der Wirtsgesteinskonfiguration stratiformes Steinsalz. Die Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien erfolgt mit Hilfe eines eigens dafür entwickelten Bewertungsmoduls. Auf Grundlage der zusammenfassenden Bewertung für jedes identifizierte Gebiet wurden 90 Teilgebiete ermittelt, welche eine günstige geologische Gesamtsituation für die Endlagerung radioaktiver Abfälle erwarten lassen [2, 5].

- StandAG: Standortauswahlgesetz vom 5. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), zuletzt geändert durch Artikel 247 der Verordnung vom 19. Juni 2020 (BGBl. I S. 1328).
- [2] BGE (2020): Zwischenbericht Teilgebiete. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH.
- [3] BGE (2020): Anwendung Ausschlusskriterien gemäß § 22 StandAG. Untersetzende Unterlage zum Zwischenbericht Teilgebiete. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH.
- [4] BGE (2020): Anwendung Mindestanforderungen gemäß § 23 StandAG. Untersetzende Unterlage zum Zwischenbericht Teilgebiete. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH.
- [5] BGE (2020): Teilgebiete und Anwendung Geowissenschaftliche Abwägungskriterien gemäß § 24 StandAG. Untersetzende Unterlage zum Zwischenbericht Teilgebiete. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH.
- [6] Teixell, A., Bertotti, G., Frizon de Lamotte, D. & Charroud, M. (2009): The geology of vertical movements of the lithosphere: An overview. Tectonophysics, Bd. 475, S. 1-8. DOI: 10.1016/j.tecto.2009.08.018.
- [7] Jähne-Klingberg, F., Stück, H., Bebiolka, A., Bense, F. & Stark, L. (2019): Prognosemöglichkeiten von großräumigen Vertikalbewegungen für Deutschland. Abschlussbericht. Hannover: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR).
- [8] Reuther, E.-U. (1989): Lehrbuch der Bergbaukunde. 11. Aufl., Essen: VGE. ISBN 3773904932.
- Grünthal, G., Stromeyer, D., Bosse, C., Cotton, F. & Bindi, D. (2018): Neueinschätzung der Erdbebengefährdung Deutschlands – Version 2016– für DIN EN 1998-1/NA. Bautechnik, Bd. 95, S. 371-384. ISSN 09328351. DOI: 10.1002/bate.201700098
- [10] May, F. (2019): Möglichkeiten der Prognose zukünftiger vulkanischer Aktivität in Deutschland. Kurzbericht. Hannover Bundesanstalt für Geowissenschaften (BGR).
- BGE (2020): Referenzdatensätze zur Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien im Rahmen von § 13 StandAG - Grundlagen. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (BGE).
- [12] Fleig, S. & Röhling, S. (2019): InSpEE-DS: Errichtung von Salzkavernen zur Speicherung erneuerbarer Energien in Doppelsalinaren und flachlagernden Salzen. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe.

Geochemie, Transport-und Rückhalteprozesse in den potentiellen Wirtsgesteinen Ton und Kristallin

T. Schäfer^a

^a Friedrich-Schiller-Universität Jena, Institut für Geowissenschaften (IGW), Angewandte Geologie, Burgweg 11, 07749 Jena, Germany

Key words: Hydrochemie, Diffusion, Matrixporisität, Bentonit-Erosion

1. Einleitung

Informationen aus dem Bereich der Geochemie/Mineralogie bzw. Hydro(geo)chemie können als Einzelbeobachtung zur Abschätzung der Transportprozesse in geologischen Formationen zur Sicherheitsbetrachtung im Sinne der "Multiple Lines of Evidence" herangezogen werden [1, 2]. Wenn ortsaufgelöste hydrochemische Daten für einzelne Wirtsgesteinsformation vorliegen, bilden diese die dominierenden Transportprozesse auf Formationsskala über die letzten Jahrmillionen ab und können für Sensitivitätsanalysen bzgl. alternativer Szenarien oder der Entwicklung der Randbedingungen verwendet werden [3]. Die geologischen oder archäologischen Daten sind oftmals von qualitativer Natur, können aber in Einzelfällen auch im Rahmen der Quantifizierung von Prozessen, z. B. zum Langzeitmaterialverhalten (Stahl-Korrosion, [4]) und somit zur Abschätzung der langfristigen Funktionsweise einer Barriere bzw. der Zeit bis zum Versagen der Barriere in eines Multibarrierensystems herangezogen werden. Solche Untersuchungslokationen oder -Systeme werden als Natürliche Analoga (NA) bezeichnet und es gibt internationale Plattformen (z. B. https://www.natural-analogues.com/), welche Studien auflistet, die gezielt das langfristige Materialverhalten unter geochemischen Randbedingungen vergleichbar der potentiellen Szenarien in einer Endlagerumgebung aber in historisch-geologischen Zeiträumen untersucht haben oder momentan untersuchen. Als ein Beispiel sei hier die Auswirkung zukünftiger Kaltperioden auf die Redox-Bedingungen und Salinität in der Endlagertiefe anhand der geochemischen Signaturen aus der geologischen Vergangenheit in Grönland erwähnt [5].

Im Folgenden werden einige der Parameter, welche direkt zur Prognose des Radionuklidaustrags durch das Multibarrierensystem zur Biosphäre (Dosisberechnung) in eine Langzeitsicherheitsanalyse eingehen für tiefengeologische Endlager für wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle betrachtet. Diese Präsentation erhebt nicht den Anspruch der Vollständigkeit, sondern soll nur einige Punkte aufzeigen und zur Diskussion anregen. Wenn wir die Synthese der Daten aus EU-Programmen wie z.B. dem Integrated Project (IP)-FUNMIG (Fundamental Processes of Radionuclide Migration) näher betrachten ([6] und das gesamte Applied Geochemistry Volume 27, Issue 2), so sind die wesentlichen beeinflussenden Faktoren für die Beurteilung der Rückhalteprozesse in der geologischen Barriere hier bereits systematisch für die die Wirtsgesteine Tonstein und kristallines Wirtsgestein gegenüber gestellt worden. Dies geschah speziell vor dem Hintergrund der vielfältigen wissenschaftlichen Daten aus dem Projekt selbst. die zu momentan 76 peer-reviewed Veröffentlichungen, also wissenschaftlich begutachteten Publikationen führten und eine hohe Transparenz und Qualitätssicherung der wissenschaftlichen Daten aufzeigt. Die erzielten Resultate aus IP-FUNMIG und die offenen Fragen nach Abschluss des Projektes führten dazu, dass auf europäischer Ebene zu einer Vielzahl der in IP-FUNMIG betrachteten Prozesse bzw. Wirtsgesteine kleinere stärker fokussierte sogenannte Collaborative Projects (CP) entstanden. Hier sei für den interessierten Leser auf die Projekte CP-SKIN (Slow processes in close-to-equilibrium conditions for radionuclides in water/solid systems of relevance to nuclear waste management) [7], CP-CROCK (Crystalline Rock Retention Processes) [8, 9], CP-CatClay (Processes of Cation Migration in Clayrocks) [10, 11], CP-BELBaR (Bentonite Erosion: effects on the Long term performance of the engineered Barrier and Radionuclide Transport) [12], CP-ReCosy (Redox Phenomena Controlling Systems) [13] und das "Research and Innovation action" (RIA) Projekt MIND (Development of the safety case knowledge

base about the influence of microbial processes on geological disposal of radioactive wastes) [14, 15] verwiesen.

2. Diffusionskontrollierter Transport im Tonstein

Die Beschreibung des gelösten Transports in Tonsteinformationen ist bereits im Rahmen der NEA ClayClub Initiative CLAYTRAC [3] für neun unterschiedliche Gesteinsformationen aus Frankreich, der Schweiz, Belgien und Großbritannien systematisch unter Verwendung des identen Modellierungsansatzes der geochemischen Daten gegenüber gestellt worden. Konservative, als nicht mit der Festphase reagierende Porenwasser-Tracer, wie z. B. Cl^- , $\delta^{18}O$, δ^2H und He zeigen regelmäßige Profile und weisen auf die Dominanz des diffusiven Transports über Zeiten von 10^5-10^6 Jahren hin [16]. Der Beitrag der vertikalen Advektion zum Transport konnte für diese Formationen als sehr begrenzt oder vernachlässigbar eingestuft werden und die modellierten Evolutionszeiten stimmten mit unabhängigen paläo-hydrogeologischen Daten sehr gut überein. Diese Studien sowie weitere detailliertere Arbeiten im Untertagelabor Mont Terri [17] zeigen sehr eindrucksvoll, dass Porenwasser in tonreichen Aquitarden eine Art geochemisches Archiv mit einem viel längeren "Gedächtnis" als Grundwasser in durchlässigeren Einheiten darstellen. Dies liegt an der Tatsache, dass die Diffusion der dominierende Mechanismus des Massentransports ist und die geochemische Anpassung an sich änderten Bedingungen im Kontakt stehender Grundwasserleiter nur sehr langsam erfolgt und somit ein rein diffusiver Transport über mehrere Millionen Jahre nachgewiesen werden kann.

Aus diesen Ausführungen wird deutlich, dass die Ionenstärke des Porenwassers in Tonsteinformationen variiert und diese einen Einfluss auf die Sorption haben kann. Für Anionen nimmt die zugängliche Porosität mit steigender Ionenstärke zu und somit auch die Diffusion der Anionen [18]. Analysen der Kationensorption über Kationenaustauschprozesse müssen immer die Sorption (K_d-Wert) und die Diffusion (effektive Diffusionskoeffizient D_e) gleichzeitig betrachten, da für die diffusive Radionuklidausbreitung die scheinbare (apparente) Diffusion D_a maßgebend ist [19]. Die Abhängigkeiten von D_e und K_d von der Ionenstärke sind stark korreliert, sodass D_a und somit die Radionuklidausbreitung nur sehr schwach von der Ionenstärke abhängt. Allerdings kann es zur Komplexbildung der Radionuklide mit Cl⁻ oder SO₄²⁻ in der veränderten Porenwasserzusammensetzung kommen, welche wiederum die Oberflächenkomplexierungs- Mechanismus [20] beeinflussen und zu einer Verminderung der Sorption führen kann. Die existierenden Oberflächenkomplexierungs- Modelle und Sorptionsdatenbanken berücksichtigen diese Radionuklidwechselwirkung in der modelltechnischen Beschreibung der Sorptionsdaten [21].

Wie aus der beispielhaften Abb. 1 ersichtlich wird, sind speziell die Parameter des Verteilungskoeffizient K_d , die maximale Löslichkeit des zu betrachtenden Radionuklids C_{sol} , der effektive Diffusionskoeffizient D_e und die Porosität ε für die Sicherheitsanalyse in diffusionskontrollierten Systemen als Eingangsparameter zu betrachten. Aus der skizzenhaften Beschreibung der Abb. 1 wird aber auch deutlich, dass diese Parameter durch einzelne Prozesse im Multibarrierensystem beeinflusst werden können.

3. Die Rolle von Matrix-Diffusion in kristallinen Formationen

In kristallinen Systemen oder auch stark kompaktierten Tonsteinsystemen wie der Palfris-Formation (Wellenberg, Schweiz) oder der Boda Clay- Formation (Ungarn) [22] wird die hydraulische Leitfähigkeit oder Permeabilität von dem Kluftsystem bzw. Kluftnetzwerk dominiert, welches vielfach durch die dimensionslose Peclet-Zahl *Pe* als Verhältnis der advektiven und diffusiven Stoffflüsse beschrieben wird. Der Effekt der Diffusion in die Gesteinsmatrix ist von numerischen Seite in vielfältiger Weise beschrieben worden (siehe u.a. [23]). In wenigen Sicherheitsanalysen wurde die (geschichtete) Gesteinsmatrix-Mikrostruktur explizit berücksichtigt, so ist in TILA-99 [24] und TURVA-2012 [25] dem direkt an die Fließwege angrenzenden Gestein eine größere effektive Diffusivität und Porosität als der ungestörten Gesteinsmatrix zugewiesen worden. Diskussion herrscht vor allem um die Diffusionslänge in verschiedenen kristallinen Systemen, hier gibt das RETROCK-Projekt eine Zusammenfassung des Umgangs mit der Matrixdiffusion in acht verschiedenen Sicherheitsbewertungen zwischen 1983 und 1999 [26]. Experimentell können bei Laboruntersuchungen nahezu unvermeidliche Artefakte durch Druckentlastung der Bohrkerne und der Behandlung im Labor entstehen. Systematische Untersuchungen zeigten hier eine



Figure 1: FEP (Features, Events and Processes)-Gruppen und einzelne FEPs (aus FEPCAT), die hier auf die Forschungsarbeiten für den tonreichen Wirtsgesteinsfall im EU- Projekt FUNMIG abgebildet wurden (aus [6], Fig 6).

Erhöhung um den Faktor 1,5-3 im Vergleich zur In-situ-Matrixporosität und der Grad des Nichtkonservativismus durch die Annahme dieser Labordaten verursacht bei der berechneten Radionuklidrückhaltung in der Geosphäre nur geringe Unterschiede [27]. In anderen Sicherheitsbewertungen wurde die Diffusion in die ungestörte Gesteinsmatrix konservativ vernachlässigt.

Ein Vergleich der aktuellen Literatur zeigt, dass die Matrixdiffusion durchaus eine standortabhängige Materialeigenschaft ist. Publikationen zur Charakterisierung des Matrix-Porenwasser (Chlorid-Profile) im Grimsel-Granodiorit und deren Beschreibung mittels Diffusionmodellen zeigen, dass die Diffusion ein wichtiger Prozess in diesen kristallinen Gesteinen im Meterbereich ist und paläohydrologische und auch neuere Veränderungen im System im Matrix-Porenwasser erhalten bleiben [28]. Im schwedischen SR-Site Modell [29] zur Sicherheitsanalyse wird die Matrix-Diffusion als unlimitiert gerechnet. Kritische Annahmen im SKB-Matrixdiffusionskonzept sind die Fick'sche Diffusion und die quasi "unendliche Diffusionlänge". Die Untersuchung und Interpretation von natürlichen Tracer-Profilen z.B. in Laxemar (Schweden) in Übereinstimmung mit unabhängigen geologischen, hydrologischen und klimatischen Bedingungen zeigt, dass die Matrixdiffusion in diesen kristallinen Gesteinen über Dekameter innerhalb von Zeitskalen von $\sim 10.000-14.000$ Jahren wirksam ist [30]. Die Annahme einer unendlichen Diffusion erfordert weiterhin einen großen Kluftabstand, damit es bei der In-Diffusion von Klüften nicht zur Überlagerung der In-Diffusion von benachbarten Klüften kommt. Die schwedische Abfallentsorgungsorganisation SKB -Wert nimmt für das Kristallin einen log (D_e) von -13,7 \pm 0,25 (m²/s) und eine Porosität von 0.18% an, welche einen log (D_p) von -10.955 ± 0.25 (mtextsuperscript2/s) ergibt. Aus diesen Werten kann eine gegenseitige Beeinflussung von Klüften mit einem Abstand von ca. 8,8 m nach 100.000 Jahren abgeschätzt werden [29]. Daher ist angesichts der gemessenen/implementierten SKB-Werte von D_p ein Abstand von 25 m als effektiv unendlich anzusehenund kleinere Kluftabstände sind bei sorbierende gelöste Stoffe ebenfalls als effektiv unendlich zu betrachten.

Komplexerer Darstellungen der Gesteinsmatrix und ihrer Folgen für die Berechnung des Einflusses auf die Radiotoxizität im Fernfeld sind auch untersucht worden [31]. Hier wurde u.a. die Heterogenität von Materialeigenschaften in einer mehrschichtigen Konzeptualisierung der Gesteinsmatrix und mehrerer Kluftklassen berücksichtigt, die unterschiedliche mikrostrukturelle Eigenschaften der Gesteinsmatrix darstellen. Diese Kluftklassen sollen auf realistischere Weise vom Endlager ausgehenden Migrationswege an der Oberfläche darstellen. Die Modellierungsergebnisse legen nahe, dass die vereinfachte, homogene Darstellung der Gesteinsmatrix auf Grundlage der Materialeigenschaften von unverändertem Gestein, wie sie in SR-Site verwendet wird [29] hauptsächlich zu einer Überschätzung der radiologischen Risiken führt. Andere Studien am Toki Granit (Japan) und Carnmenellis Granite (UK) zeigen allerdings eine limitierte Matrix-Diffusion von Zentimetern über Zeiträume von Millionen von Jahren [32] und unterstreichen noch einmal die Notwendigkeit der gesteins- und formationsspezifischen Untersuchungen.

3.1. Integrität der Bentonitbarriere

Die SR-Site Sicherheitsbewertung hat zwei Szenarien identifiziert, die möglicherweise zur Freisetzung von Radionukliden führen können und aufgrund der Wahrscheinlichkeit nicht definitiv ausgeschlossen werden können; eines dieser Szenarien ist die Korrosion des Bentonit- Puffer-/ Rückfüllmaterial [33]. Hier zeigen neuere Studien im Kontext der Geothermie speziell in Orogenen einen tiefen Eintrag von meteorischen Wässern [34] aber auch in Kaltperioden konnte Infiltration meteorischen Wassers bis ~1000m beobachtet werden [35]. Der Vortrag wird sich u.a. mit Projekten zur Integrität der Bentonit-Barriere unter glazialen Schmelzwasserbedingungen und speziell dem Aspekt des Austrags von Tonmineralkolloiden als potentieller Träger von stark sorbierenden Radionukliden und dem Einfluss der Kluftgeometrie auf die Erosion der geotechnischen Barriere beschäftigen [12, 36-38].

- OCDE/AEN, Geological Disposal: Building Confidence Using Multiple Lines of Evidence. 2004: First AMIGO Workshop Proceedings - Yverdon-les-Bains, Switzerland, 3-5 June 2003, Radioactive Waste Management, Éditions OCDE, Paris, https://doi.org/10.1787/9789264015937-en.
- [2] Röhlig, K.-J., P. Hocke, and A. Eckhardt, Safety case and transdisciplinary research. Assessing safety by numbers, multiple lines of evidence and collective actors. 2018, Vortrag bei: The Integration Group for the Safety Case Symposium 2018 Current Understanding and Future Direction for the Geological Disposal of Radioactive Waste (IGSC 2018), Rotterdam, Niederlande, 10.–11.10. 2018.
- [3] NEA, Natural tracer profiles across argillaceous formations: the CLAYTRAC project. 2009, NEA-OECD (Nuclear Energy Agency - Organisation for Economic Co-Operation and Development): Paris. p. 361.
- [4] King, F., Corrosion of carbon steel under anaerobic conditions in a repository for SF and HLW in Opalinus Clay Technical report 08-12. 2008: Switzerland. p. 56.
- [5] Drake, H., et al., Quaternary redox transitions in deep crystalline rock fractures at the western margin of the Greenland ice sheet. Applied Geochemistry, 76, 196-209 (2017).
- [6] Schwyn, B., et al., FUNMIG Integrated Project results and conclusions from a safety case perspective. Applied Geochemistry, 27(2), 501-515 (2012).
- [7] Thien, B.M.J., D.A. Kulik, and E. Curti, A unified approach to model uptake kinetics of trace elements in complex aqueous solid solution systems. Applied Geochemistry, 41, 135-150 (2014).
- [8] Schmeide, K., et al., Interaction of U(VI) with Aspo diorite: A batch and in situ ATR FT-IR sorption study. Applied Geochemistry, 49, 116-125 (2014).
- [9] Huber, F.M., et al., Tc interaction with crystalline rock from Äspö (Sweden): Effect of in-situ rock redox capacity. Applied Geochemistry, 80, 90-101 (2017).
- [10] Glaus, M.A., et al., Cation diffusion in the electrical double layer enhances the mass transfer rates for Sr2+, Co2+ and Zn2+ in compacted illite. Geochimica Et Cosmochimica Acta, 165, 376-388 (2015).
- [11] Montoya, V., et al., Sorption of Sr, Co and Zn on illite: Batch experiments and modelling including Co in-diffusion measurements on compacted samples. Geochimica et Cosmochimica Acta, 223, 1-20 (2018).
- [12] Shelton, A., et al., Synthesis report: Colloids and related issues in the long term safety case. SKB Technical report TR-17-17. 2018.
- [13] Duro, L., et al., Redox processes in the safety case of deep geological repositories of radioactive wastes. Contribution of the European RECOSY Collaborative Project. Applied Geochemistry, 49, 206-217 (2014).
- [14] Pedersen, K., et al., Mobility and reactivity of sulphide in bentonite clays Implications for engineered bentonite barriers in geological repositories for radioactive wastes. Applied Clay Science, 146, 495-502 (2017).
- [15] Boylan, A.A., et al., H-2-fuelled microbial metabolism in Opalinus Clay. Applied Clay Science, 174, 69-76 (2019).
- [16] Mazurek, M., et al., Natural tracer profiles across argillaceous formations. Applied Geochemistry, 26(7), 1035-1064 (2011).
- [17] Mazurek, M. and A. de Haller, Pore-water evolution and solute-transport mechanisms in Opalinus Clay at Mont Terri and Mont Russelin (Canton Jura, Switzerland). Swiss Journal of Geosciences, 110(1), 129-149 (2017).
- [18] Van Loon, L.R., M.A. Glaus, and W. Müller, Anion exclusion effects in compacted bentonites: Towards a better understanding of anion diffusion. Applied Geochemistry, 22(11), 2536-2552 (2007).
- [19] Cloet, V., et al., Einfluss der Salinität des Porenwassers der Wirtgesteine auf die Langzeitsicherheit der Tiefenlager. Nagra Arbeitsbericht NAB 14-09, 52 (2014).
- [20] Geckeis, H., et al., Mineral-Water Interface Reactions of Actinides. Chemical Reviews, 113(2), 1016-1062 (2013).
- [21] Schnurr, A., et al., Sorption of Cm(III) and Eu(III) onto clay minerals under saline conditions: Batch adsorption, laser-fluorescence spectroscopy and modeling. Geochimica Et Cosmochimica Acta, 151, 192-202 (2015).
- [22] Mazurek, M., et al., Transferability of geoscientific information from various sources (study sites, underground rock laboratories, natural analogues) to support safety cases for radioactive waste repositories in argillaceous formations. Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C, 33(Supplement 1), S95-S105 (2008).
- [23] Carrera, J., et al., On matrix diffusion: formulations, solution methods and qualitative effects. Hydrogeology Journal, 6(1), 178-190 (1998).
- [24] Vieno, T. and H. Nordman, Safety assessment of spent fuel disposal in Hästholmen, Kivetty, Olkiluoto and Romuvaara, TILA-99. Report Posiva 99-07. 1999, Posiva Oy.

- [25] POSIVA, Safety case for the disposal of spent nuclear fuel at Olkiluoto Models and data for the repository system 2012. Report Posiva 2013-01. 2013: Posiva Oy, Finland.
- [26] SKB, RETROCK Project: Treatment of geosphere retention phenomena in safety assessments. Scientific basis of retention processes and their implementation in safety assessment models. Work package 2 report of the RETROCK concerted action. 2005, SKB report R-04-48: Sweden.
- [27] Ota, K., et al., Influence of the mode of matrix porosity determination on matrix diffusion calculations. Journal of Contaminant Hydrology, 61, 131-145 (2003).
- [28] Eichinger, F., et al., Profiles of chloride in matrix porewater as natural tracer for matrix diffusion in crystalline rocks. Applied Geochemistry, 118, 12 (2020).
- [29] SKB, Radionuclide transport report for the safety assessment SR-Site. 2010, SKB technical report TR-10-50: Sweden.
- [30] Waber, H.N., T. Gimmi, and J.A.T. Smellie, Reconstruction of palaeoinfiltration during the Holocene using porewater data (Laxemar, Sweden). Geochimica Et Cosmochimica Acta, 94, 109-127 (2012).
- [31] Crawford, J. and M. Löfgren, Modelling of radionuclide retention by matrix diffusion in a layered rock model. SKB report R-17-22. 2019, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- [32] Wogelius, R.A., et al., Mineral reaction kinetics constrain the length scale of rock matrix diffusion. Scientific Reports, 10(1) (2020).
- [33] Selroos, J.-O. and S.L. Painter, Effect of transport-pathway simplifications on projected releases of radionuclides from a nuclear waste repository (Sweden). Hydrogeology Journal, 20(8), 1467-1481 (2012).
- [34] Diamond, L.W., C. Wanner, and H.N. Waber, Penetration depth of meteoric water in orogenic geothermal systems. Geology, 46(12), 1063-1066 (2018).
- [35] Ravier, E. and J.F. Buoncristiani, Chapter 12 Glaciohydrogeology, in Past Glacial Environments (Second Edition), J. Menzies and J.J.M. van der Meer, Editors. 2018, Elsevier. p. 431-466.
- [36] Huber, F.M., et al., Impact of fracture geometry on bentonite erosion a numerical study. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, (2021 (in review)).
- [37] Noseck, U., et al., Integrity of the bentonite barrier for the retention of radionuclides in crystalline host rock experiments and modeling - (Project KOLLORADO-e2; Final report); KIT scientific report 7757. 2020: KIT, Karlsruhe. 210.
- [38] Bouby, M., et al., Erosion dynamics of compacted raw or homoionic MX80 bentonite in a low ionic strength synthetic water under quasi-stagnant flow conditions. Applied Clay Science, 198, 105797 (2020).

Conceptual models for predicting the chemical evolution of HLW and ILW disposal cells in clay and crystalline rocks

Vanessa Montoya^a, Javier Samper^b, Laurent De Windt^c, Joan.Govaerts^d, Luis Montenegro^b, Diederik Jacques^d, Georg Kosakowski^e, Jaime Garibay-Rodriguez^a, Markku Leivo^f

^aHelmholtz Centre for Environmental Research-UFZ -Department of Environmental Informatics, Leipzig (Germany) ^bUniversity of A Coruña - Center of Advanced Scientific Research (CICA), School of Civil Engineering, A Coruña (Spain)

^cMINES ParisTech, PSL University, Centre de Géosciences, Fontainebleau, (France)

^dBelgian nuclear research centre- SCK CEN, Institute for Environment, Health and Safety, Mol (Belgium)

^ePaul Scherrer Institut – PSI - Laboratory for Waste Management, Villigen, (Switzerland)

^fTechnical Research Centre of Finland - VTT, Espo (Finland)

Key words: reactive transport, gas transport, canister corrosion, bentonite, concrete degradation

1. Introduction

The 1st European Joint Programme on geological disposal of radioactive waste (EURAD) co-founded by the Horizon 2020 European programme was initiated in June 2019. Main activities within EURAD consist on R&D and strategic studies aiming at developing and consolidating Scientific and Technical knowledge of repository concepts as well as addressing safety concerns in different European countries. In this framework, the work described in this contribution is included in WP2 – ACED (Assessment of Chemical Evolution of ILW and HLW Disposal Cells) of EURAD. The broad scope of this WP is the assessment of the chemical evolution at the waste disposal package and its direct engineered and natural surroundings involving the interaction of different materials and the expected thermal, hydraulic and/or chemical gradients. Different Intermediate (ILW) and High (HLW) Level Waste disposal concepts representative for different concepts throughout Europe are part of this work.

Conceptual models and mathematical formulations for mechanistic reactive transport models have been developed in the first year of the project to simulate the chemical evolution at large temporal (i100 000 years) and spatial scales. Representative designs are set for ILW and HLW disposal cells in both crystalline and sedimentary rock types (see Figure 1). State of the art knowledge is considered into robust mathematical frameworks implemented in the reactive transport codes OpenGeoSys v.6 [1], HYTEC [2] and CORE2D v5 [3].

2. Representative conceptual models in HLW and ILW

The generic configuration of both HLW disposal cell concepts in granite and clay are very similar and consider solute diffusion as the main solute transport mechanism. Differences of both concepts are only related to the buffer material and obviously the host rock considered. The thermal gradient is considered to be present in both concepts during the first 1 000 years. The nuclear vitrified glass (the French reference SON-68) is contemplated as an equivalent porous medium accessible only to water after the failure of the low alloy carbon-steel overpack (5 cm thick) due to corrosion. A bentonite-base buffer (saturated FEBEX bentonite) and the Spanish Reference Granitic host rock are used in the case of the HLW concept in granite. A cement-base buffer (composed of Portland cement and calcareous aggregate without any reinforcement by steel structures or alternatively, of low-pH cement/bentonite grout) and the French Callovo-Oxfordian claystone is taken into account in the HLW concept in clay. The carbon-steel canister corrosion is kinetically controlled and the material is chemically treated in both HLW reference concepts as a non-porous material made of 100% metallic iron at the initial stage, and then as a porous material filled by corrosion products and remaining metallic iron.

The L/ILW disposal concepts studied here are based on a multi-barrier system including the waste matrix (in the primary package), the disposal container, the mortar backfill in the emplacement tunnel

(where the disposal containers are located) and the clay or crystalline host rock. It is assumed that the disposal cell is part of a repository at a depth between 200 and 800 m below the surface. Tunnel walls are reinforced with a shotcrete (liner) to control geomechanical processes (i.e. stress redistribution). The geometry inside the waste region indicated in Fig. 1 is assumed to contain a number of waste containers with a backfilling material between them and different waste packages inside the containers. Shapes of the waste containers are typically cylindrical or box-shaped; the latter being more representative in the different designs throughout Europe and for this reason selected in this work. The box-shaped waste containers are piled up in a number of stacks depending on the dimension of the waste package and the disposal cell. The box-shaped waste container consists of a reinforced concrete material, including inside a number of primary coli (4 drums) or waste package make of steel with nuclear waste inside. The empty space inside of the container is additionally backfilled with a cement-based material. The disposal concept also includes the EDZ around the L/ILW emplacement caverns in clay rock. Based on modelling results, it is known that the extent of the EDZ around the L/ILW emplacement caverns will not exceed a thickness of one cavern diameter and that the hydraulic conductivity of the EDZ around the emplacement caverns, will not exceed a value of 10-7 m/s.



Figure 1: Layout of the representative HLW and ILW disposal cells (the lines in the granite represent fractures)

All the nuclear waste is a mixture of metallic and organic waste backfilled with cementitious material. The organic waste consists on a mixture of slow and fast degradable materials containing cellulose, halogenated and non-halogenated plastics, ion-exchange resins and rubber. During the first years of disposal, the most important processes affecting near-field chemical evolution are the saturation of the concrete and cementitious grouts with porewater migrating inwards from the host rock. Significant amounts of reactive and non-reactive gases (mainly hydrogen, carbon dioxide and methane) are gener-
ated during the long period of disposal time as a result of various processes, mainly comprising the i) anaerobic corrosion of metals and ii) the degradation of organic compounds by microbial and chemical processes. Another important aspect in the modelling is that the majority of the degradation reactions mentioned above, specially corrosion of metals, are water-mediated. This means the water influx from the host rock limits both the rate of barrier degradation and the rate at which dissolved contaminants can be transported away from the waste packages.

3. Outlook

Within ACED, these models will serves as benchmarks for evaluation of model abstraction methodologies. The abstracted models will then replace the complex, numerically advanced and computational expensive models in uncertainty and sensitivity studies. Furthermore, the information gained through the study of generic but European representative HLW and ILW disposal cells will later be used and adapted for more specific, national disposal cell designs as required in Germany. The outcome of this modelling work will also benefit the safety case in different ways such as with respect to material specifications and establishment of requirements for deposition scenarios.

- Bilke, L., Flemisch, B., Kolditz, O., Helmig, R., Nagel T., Development of open-source porous-media simulators: principles and experiences. Transport in Porous Media. 130 (1), 337 – 361 (2019)
- [2] van der Lee, J., De Windt, L., Lagneau, Goblet, P., Module-oriented modeling of reactive transport with HYTEC. Computers and Geosciences 29, 265–275. (2003)
- [3] emphÁguila J. F, Samper, J., Mon, A., Montenegro, L., Dynamic update of flow and transport parameters in reactive transport simulations of radioactive waste repositories, Applied Geochemistry. 117, 104585 (2020)

Untersuchungen zur Wärmeentwicklung von hybriden Zementen

Ricky Henning^a, Patrick Sturm^a, Hans-Carsten Kühne^a, Sylvia Keßler^b, Gregor J. G. Gluth^a

^aBundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), 12205 Berlin, Deutschland ^bHelmut-Schmidt-Universität/Universität der Bundeswehr Hamburg, 22043 Hamburg, Deutschland

Key words: Hybride Zemente, Kalorimetrie

1. Einleitung und Motivation

Die Hauptfunktion von Verschlussbauwerken für End- und Zwischenlager von radioaktiven Abfällen besteht in der Erhaltung der geologischen Barriere. Vor allem soll ein potenzieller Stofftransport durch eine möglichst geringe Permeabilität des Bauwerks verhindert bzw. auf vernachlässigbare Werte herabgesetzt werden. Die in-situ-Permeabilität des Verschlussbauwerks steht dabei in direktem Zusammenhang mit dessen Poren- und Makrostruktur, welche bei Bauwerken auf Basis von Beton insbesondere durch Schwind-verformungen und durch thermisch induzierte Rissbildung infolge der Reaktionswärmeentwicklung des Bindemittels gestört werden kann. Die Betone müssen daher neben einer hohen chemischen Langzeit-stabilität auch eine geringe bzw. langsame Wärmeentwicklung während der Erhärtungsreaktionen aufweisen. Als hybride Zemente werden Mischungen aus Portlandzement, Betonzusatzstoffen und einem alkalischen Aktivator bezeichnet. Dabei können u. a. Alkalisulfate, Alkalicarbonate, Alkalisilicate und Alkalihydroxide als Aktivatoren zum Einsatz kommen [1, 2]. Aufgrund ihrer hohen chemischen Stabilität im salinaren Milieu [3] sind Betone aus solchen Zementen potenziell besonders gut als Verfüllmaterial für End- und Zwischenlager im Steinsalz geeignet. In der vorliegenden Studie wurden daher hybride Zemente hinsichtlich ihrer Wärmeentwicklung in einem isothermen Kalorimeter sowie hinsichtlich Phasenbestand und Festigkeiten untersucht. Hybride Zementleime wurden auf Basis von Portlandklinker, Hüttensandmehl, Flugasche und Natriumsulfat hergestellt und die Zusammensetzungen systematisch variiert, um den Einfluss der Komponenten auf Wärmeentwicklung, Phasenbestand und mechanische Eigenschaften der Leime zu untersuchen (Tabelle 1); zusätzlich wurden zu Vergleichszwecken ein Zementleim auf Basis der Beton-rezeptur M2 der DBE [4] sowie eine alkalisch aktivierte Flugasche (FA-5) untersucht.

2. Ergebnisse

Die hybriden Zemente setzten innerhalb von 7 Tagen Wärmemengen von 71-140 J/g Feststoff frei; die alkalisch aktivierte Flugasche (FA-5) und das Bindemittel (Hochofenzement und Flugasche) des Salzbetons M2 setzten Wärmemengen von 56 J/g Feststoff bzw. 125 J/g Feststoff frei (Tabelle 1, Abb. 1 links). Anhand der Wärmeflusskurven (Abb. 1 rechts) lässt sich erkennen, dass die Leime mit 5 M.-% Portlandklinker (S2–S12) eine Induktionsperiode aufwiesen. Dieser folgte ein Maximum der Wärmeentwicklung nach ca. 30–50 h, welches sich vorläufig der Reaktion von Hüttensandmehl und Flugasche zuordnen lässt. Durch einen höheren Gehalt an Natriumsulfat wurde die Induktionsperiode verlängert. Dagegen verursachte ein erhöhter Gehalt an Portlandklinker (OP3) eine Verkürzung der Induktionsperiode. Bedingt durch die Hydratation des Klinkers zeigte sich für OP3 ein weiteres Maximum bei etwa 20 h. Die 28-Tage-Druckfestigkeiten der hybriden Zemente lagen im Bereich 13–25 MPa (Abb. 2 rechts). Die Formulierung mit dem höchsten Portlandklinkergehalt (OP3) setzte die größte Wärmemenge frei (139,5 J/g Feststoff, Tabelle 1) und entwickelt die höchste Druckfestigkeit (24,5 MPa, Abb. 2 rechts). Die Formulie-rung ohne Klinker (OP0) wies eine höhere Druckfestigkeit als die Leime der S-Reihe (5 M.-% Klinker) auf. Die Diffraktogramme der erhärteten Zementleime (Abb. 2 links) zeigen neben unreaktiven Bestandteilen der Flugasche (Mullit und Quarz) v. a. Ettringit, Calcium(-Natrium)-Aluminium-Silicat-Hydrat [C(-N)-A-S-H] und Calcit. Der hybride Zement mit einem Natriumsulfatgehalt von 12 M.-% (S12) wies nach 28 Tagen zusätzlich Thenardit auf (Übersättigung der Porenlösung mit Natriumsulfat). Die dargestellten Ergebnisse zeigen, dass hybride Zemente mit M2 vergleichbare Festigkeiten erbringen, dabei aber z. T. erheblich geringere Wärmemengen bei der Erhärtung freisetzen. Zusätzliche Unter-suchungen, insbesondere hinsichtlich Beständigkeit gegenüber salinaren Lösungen und Schwindverhalten, werden gegenwärtig durchgeführt, um weitere Aspekte der Eignung hybrider Zemente für Verschlussbau-werke bewerten zu können.

Leim	Wärmemenge $[J/g \text{ Feststoff}]$
OP0	70,8
OP3	139,5
S2	79,1
S4	90,8
S12	105,2
FA-5	56,3
M2	125,0

Table 1: Auswahl untersuchter Zementleime und ihrer freigesetzten Wärmemengen nach 7 Tagen. OP0: 0 M.-% Portlandlinker, OP3: 14,4 M.-% Portlandlinker; S2, S4 und S12: Leime mit 5 M.-% Portlandklinker und 2 M.-%, 4 M.-% bzw. 12 M.-% Natriumsulfat; M2 und FA-5 s. Text.



Figure 1: Freigesetzte Wärmemengen (links) und Wärmeflüsse (rechts) der Zementleime.



Figure 2: Diffraktogramme nach 28 Tagen (links) und Druckfestigkeiten nach 7 und 28 Tagen (rechts) der Zementleime. Die Abszisse der linken Abbildung zeigt 2θ in ° (Cu-K α -Strahlung); prominente Reflexe sind bezeichnet: E=Ettringit, M=Mullit, Qu=Quarz, CH=Portlandit, Cc=Calcit; A=Alit; B=Belit, T=Thenardit.

- Donatello, S., Fernandez-Jimenez, A., Palomo, A.: Very high volume fly ash cements. Early age hydration study using Na2SO4 as an activator. Journal of the American Ceramic Society, 96, 900-906 (2013).
- [2] Alahrache, S., Winnefeld, F., Champenois, J.-B., Hesselbarth, F., Lothenbach, B.: Chemical activation of hybrid binders based on siliceous fly ash and Portland cement., Cement and Concrete Composites, 66, 10-23 (2016).
- [3] Palomo, A., Monteiro, P., Martauz, P., Bilek, V., Fernandez-Jimenez, A.: Hybrid binders: a journey from the past to a sustainable future (opus caementicium futurum). Cement and Concrete Research, 124, 105829 (2019).
- [4] DBE: Verfüllmaterial für Strecken mit hohen Anforderungen Materialeigenschaften und Materialkennwerte Salzbeton M2, 2004

Smart K_d -concept as efficient approach to improve geochemistry in reactive transport modelling for repository safety assessment

M. Stockmann^a, U. Noseck^b, J. Flügge^b, A. Gehrke^b, V. Brendler^a

^aHelmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) e.V., Institute of Resource Ecology, Dresden, Germany ^bGesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, Germany

Key words: Distribution coefficient, Radionuclides, Performance assessment, Sorption, Speciation

1. Introduction

A key component of performance assessment (PA) for radioactive waste repositories in deep geological formations is the forecast of potential radionuclide transport through the repository system. Understanding and appropriate modelling of all relevant (hydro-)geochemical processes is essential for predicting the migration of radionuclides. One important retardation process is sorption on mineral surfaces of the host rock or sedimentary overburden. For the quantification of the radionuclide retention the solid/liquid distribution coefficients (K_d-values) calculated for a given groundwater/rock system are traditionally used in reactive transport modelling (RTM) and most often considered as a constant value due to the large temporal and spatial scales considered in PA. Such a conventional concept has the advantage to be simple and computationally fast but cannot reflect changes in geochemical conditions that are expected during the evolution of the repository system caused by climatic or geological changes. Due to the German safety criteria with an assessment period of one million years it is necessary to consider the impact of such hydrogeological and geochemical changes on the radionuclide transport and retardation. The challenge for large-scale RTM is the integration of important geochemical parameters and processes at affordable computational costs into the codes. Most often a full direct coupling of a transport code with a geochemical speciation code, however, leads to unacceptably long computational times for PA relevant systems.

As an effective way to integrate variable geochemistry in RTM, we developed the smart K_d -concept (www.smartkd-concept.de), a mechanistic approach mainly based on surface complexation models and implemented it into a transport code [1], [2]. The philosophy behind this approach is to compute a-priori multidimensional look-up tables with distribution coefficients (referred to as smart Kd-values as they are based on mechanistic sorption models) for a wide range of important environmental input parameters. Such parameters are typically pH, ionic strength, concentration of competing cations and complexing ligands such as calcium (Ca) and dissolved inorganic carbon (DIC). These smart K_d -values can be accessed during each transport simulation step. Equations describing pH and concentrations of ions as a function of mineral phases are implemented into the transport code, and the resulting values are used to obtain the corresponding smart K_d -values from the look-up table. The smart K_d values are calculated using the geochemical code PHREEQC [3] with a bottom-up approach, i.e. the mineral-specific sorption of dissolved species on each single mineral phase contributes to the distribution coefficient for the whole sediment. Parameter variation was performed with the numeric tool UCODE [4].

2. Results of Application case for Proof-of-Concept

The capability of this approach is demonstrated for the sorption of repository-relevant radionuclides (isotopes of Am, Cm, Cs, Ni, Np, Pu, Ra, Th and U) and possible migration scenarios through a typical sedimentary rock system covering potential repository host rocks, namely salt and clay formations in Northern Germany as natural geological barrier for a deep geological repository site. This serves as a comprehensive proof-of-concept and demonstrates the capability to describe the sorption behaviour in dependence of changing geochemical conditions quite well. As a side-effect, the large K_d-matrices that were computed can be further analysed by sensitivity and uncertainty analysis (SA/UA) as provided by SimLab2.2/4 [5], [6].

Results of this case study showed that the smart K_d approach goes considerably beyond the conventional concepts. We can illustrate that constant Kd values previously used in transport simulations, here exemplarily shown for uranium U(VI) (Figure 1, right, green line [7]), are a rough approximation, as in reality they rather range over several orders of magnitude. Moreover, with the results from SA, those input parameters influencing strongest the radionuclide retardation variation can be identified (key parameters of the model). The calculated sensitivity indices allowed us to rank all parameters with respect to sensitivity on K_d . From the visualized smart K_d matrix for U(VI) (Figure 1, left) it is obvious that mainly the pH value and the DIC determine the sorption of U(VI) under the given conditions. SA is a useful means for reducing the complexity of a geochemical model by focusing on the most important input parameters.



Figure 1: Results for 10 000 pre calculated smart K_d -values for U(VI) sorption in a sandy aquifer based on random sampling $(K_d \text{ in } m^3 \text{ kg}^{-1}, \text{ logarithmic scale, UAF} = \text{upper aquifer})$: Left: Multidimensional smart K_d -matrix as a function of pH, [DIC], and [Ca]. Right: Histogram with main statistical characteristics.

Acknowledgement

This work is funded by the German Federal Ministry for Economic Affairs and Energy (BMWi) under contract Nos. 02 E 10518+02 E 10528, 02 E 11072A-B and 02E11668A-C.

- Stockmann, M. et al., Smart K_d-values, their uncertainties and sensitivities Applying a new approach for realistic distribution coefficients in geochemical modeling of complex systems, Chemosphere, 187, 277-285 (2017).
- [2] Noseck, U. et al., Smart K_d-concept for long-term safety assessments Extension towards more complex applications. Report GRS-500. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig (2018).
- [3] Parkhurst, D.L., Appelo, C.A.J., U.S. Geological Survey Techniques and Methods, Book 6, Chap. A43, Amsterdam (2013).
- [4] Poeter, E.P. et al., U.S. Geological Survey Techniques and Methods, Report GWMI 2014-02 (2014).
- [5] Simlab Software for Uncertainty and Sensitivity Analysis (available from the Joint Research Center JRC, Ispra).
- [6] Becker, D.-A., Report GRS-411, Braunschweig (2016).
- [7] Suter, D., Biehler, D., Blaser, P., Hollmann, A., Proceedings DisTec 98, 581-584 (1998).

f-element sorption onto K-feldspar – A comprehensive characterization of mechanism and thermodynamics

J. Neumann^a, H. Brinkmann^a, S. Britz^b, J. Lützenkirchen^c, F. Bok^a, M. Stockmann^a, V. Brendler^a, T. Stumpf^a, M. Schmidt^a

^aHelmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR), Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden, Germany ^bGesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Theodor-Heuss-Straße 4, 38122 Braunschweig, Germany

^cKarlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany

Key words: sorption, trivalent, lanthanides, actinides, K-feldspar, TRLFS, SCM

1. Introduction

Transport of contaminants, e.g. radionuclides, in the environment depends strongly on their interactions with mineral phases. In a repository for radioactive waste, crystalline rock (e.g. granite) as one potential host rock in Germany and many other countries, may affect the mobility of radionuclides. Main constituents of granite are feldspars. In spent nuclear fuel, trivalent actinides (Am, Cm, but also Pu) contribute strongly to the radiotoxicity. Therefore, this work studies the retention of Am and Cm, as well as their rare earths element analogues (Eu, La, Lu, Nd, Y) on K-feldspar. By combining batch sorption experiments and time-resolved laser-induced fluorescence spectroscopy (TRLFS), a generic surface complexation model (SCM) was obtained that is valid for all investigated M³⁺. Thermodynamic sorption data were obtained and an understanding of sorption mechanisms on the molecular level was achieved.

2. Results

Batch sorption experiments were performed over a broad range of environmental conditions (pH 4 – 10, $[M^{3+}] = 52 \text{ nM} - 10 \mu \text{M}$, 3 – 50 g/L K-feldspar (dp ; 21 μm ; 63 – 200 μm))[1]. Sorption is weak for pH ; 5, strongly increases between pH 5 – 7 and reaches complete uptake at higher pH. By deconvolution of Cm emission spectra, an inner-sphere complex and its first two hydrolysis forms were found to be responsible for retention in this pH range.

For determination of the deprotonation constant pKa of K-feldspar, as one important input parameter of the model, column titration experiments were conducted. Batch sorption results of all studied M^{3+} were used to develop two alternative SCMs. The experimental sorption data were used to determine surface complexation parameters by coupling the parameter estimation code UCODE with PHREEQC (SCM-A). In a second approach, spectroscopic data were also considered (SCM-B). A generic approach was used to develop the geochemical models that satisfactorily describe all of the derived M^{3+}/K feldspar sorption edges as well as TRLFS-derived speciation. The model delivered respective stability constants of the sorption complexes, which were added to the data base of the Smart K_d -concept[2]. Therefore, this work improves the risk assessment of repositories for radioactive waste.



Figure 1: Experimental batch sorption data (symbols) and calculation results using the two developed SCMs for different experimental conditions.[1]

- Neumann, J. et al., "A comprehensive study of the sorption mechanism and thermodynamics of f-element sorption onto K-feldspar", J. Colloid Interface Sci. (2020). https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.11.041.
- [2] Stockmann, M. et al., "Smart Kd-values, their uncertainties and sensitivities Applying a new approach for realistic distribution coefficients in geochemical modeling of complex systems", Chemosphere., 187, 277–285 (2017).

Spatially-resolved sorption of Cm(III)/Eu(III) on heterogeneous crystalline rocks

M. Demnitz^a, K. Molodtsov^a, S. Schymura^a, A. Schierz^a, K. Müller^a, T. Stumpf^a, M. Schmidt^a

^aHelmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Institute of Resource Ecology, Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden, Germany

Key words: host rock, transport, retention, actinides

1. Introduction

Many countries will use deep geological repositories (DGR) to store their heat generating high-level radioactive waste. Crystalline rock is one of the potential host rocks, but possesses high inherent mineralogical heterogeneity. Since the molecular retardation reactions of radionuclides at water-mineral interfaces depend mainly on the availability of reactive sites, heterogeneity is expected to play a major role for contaminant transport in a DGR. The fundamental understanding and transferrability of this heterogeneity into modeling different transport scenarios is of urgent need for a reliable safety assessment of a repository. Through correlation of spectroscopic information with spatial resolution we characterized the nanostructure of crystalline rock surfaces and the surface speciation of selected radionuclides, namely Eu(III) and Cm(III) thereon. We utilized vertical scanning interferometry, autoradiography, and Raman microscopy in combination with μ TRLFS – microfocus time-resolved laser-induced fluorescence spectrsocopy.[1] Using these novel techniques the surface speciation of Eu(III) and Cm(III) can be qualified and quantified. Moreover, we were able to correlate mineralogy, topography, and grain boundary effects with radionuclide speciation, allowing us to draw conclusions about radionuclide retention mechanisms on mineral surfaces.

2. Results

Our work focussed on granite from Eibenstock (Germany) and migmatised gneiss from the Bukov URL (Czech Republic) (see Figure 1). We characterized the sorption of Cm(III) and Eu(III) on feldspar, mica, quartz and accessory mineral areas on both rocks. [1, 2, 3] Using autoradiography and µTRLFS we linked the sorption uptake on the heterogeneous surface with the mineralogy and the surface roughness, showing that surface roughness within the same mineral phase has an impact not only on the amount of sorption uptake, but also the radionuclide surface speciation and thus bond strengths and reversibility.



Figure 1: (Left) Thin section of granite that shows the correlation between (middle) sorption uptake measured using autoradiography and (right) topography determined by interferometry.

Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021

Using μ TRLFS we identified how the speciation correlates to mineral phases and surface roughness. A higher surface roughness induces more binding sites available to Eu(III) and Cm(III) resulting in strongly bound trivalent radionuclide surface complexes and a higher sorption uptake (see Figure 2). On quartz and feldspar high surface roughness leads to ternary Cm(III) complex formation on the surface presumably with silicate and carbonate ions available in solution.



Figure 2: Region of interest analysis to determine (left) mineralogy using Raman-microscopy, (middle) sorption uptake using µTRLFS and (right) peak maximum position by Gaussian peak fitting.

In comparison to Eibenstock granite, Bukov gneiss inherently contained a greater number of accessory minerals. We observed that some of them seem to dominate the sorption process, lowering the sorption of Eu(III) on the major components feldspar and quartz in comparison to Eibenstock granite.[2] The leftover Cm(III)/Eu(III) sorb on stronger and preferential sorption sites, which are located in regions exhibiting a high surface roughness.[3] This could be clearly proven for Cm(III)/Eu(III) surface complexes being stronger on feldspar. With this work we demonstrated a successful upscaling approach to derive molecular understanding of radionuclide retention processes from the nm to the cm sacle.

Acknowledgements

We gratefully acknowledge the funding provided by the German Federal Ministry of Education and Research (BMBF) (Grant 02NUK053E) and The Helmholtz Association (Grant SO-093) and UJV Rez for providing the Bukov migmatised gneiss drill core.

- Molodtsov, Sorption of Eu(III) on Eibenstock granite studied by µTRLFS: A novel spatially-resolved luminescencespectroscopic technique, Scientific Reports, 9, 6287 (2019).
- [2] Molodtsov, A μTRLFS investigation on the sorption of Eu³⁺ on Bukov migmatised gneiss on the molecular level, Environmental Science & Technology, submitted.
- [3] Demnitz, A spatially-resolved study on the sorption of Cm(III) on different crystalline rocks using surface investigation techniques, in preparation.

Uranium(VI) reduction by a sulphate-reducing microorganism in Opalinus Clay pore water

S. Hilpmann, B. Drobot, R. Steudtner, F. Bok, T. Stumpf, A. Cherkouk

 $Helmholtz\hbox{-}Zentrum\ Dresden-Rossendorf,\ Institute\ of\ Resource\ Ecology,\ Dresden,\ Germany$

Key words: Uranium(VI) reduction, sulphate-reducing bacteria, clay rock

1. Introduction

Clay formations are potential host rocks for the long-term storage of high-level radioactive waste in a deep geological repository in Germany, besides salt and crystalline rock. A multi-barrier system is favored, consisting of the technical (container with the waste), the geotechnical (sealing and backfilling material, e.g. bentonite) and the geological barrier (host rock) to isolate it from the biosphere.

Different studies showed that sulphate-reducing microorganisms, especially Desulfosporosinus species, occur in various clay formations, as well as in bentonite [1, 2]. Desulfosporosinus hippei DSM 8344 is an anaerobic spore-forming microorganism isolated from permafrost soil [3] and a close phylogenetic relative of the Desulfosporosinus species detected in clay formations. Therefore, this strain was selected to study the reduction of uranium(VI) to the less mobile uranium(IV).

2. Results

A time-dependent experiment in artificial Opalinus Clay pore water [4] (100 μ M uranium(VI), pH 5.5) revealed a 95 % removal of uranium from the supernatant within 24 h. The corresponding microscopy of live/dead stained cells showed the formation of agglomerates and an increasing number of dead cells within the incubation time. The black colouring of the agglomerates already provided hints of the occurring reduction of uranium(VI).

Different aqueous species including uranyl(VI) lactate and uranyl(VI) carbonate complexes are present in the supernatant, as determined by time-resolved laser-induced luminescence spectroscopy. The assignment of the different species was possible by comparison with reference spectra. While the amount of the uranyl(VI) lactate complex decreased with the incubation time, the uranyl(VI) carbonate fraction remained almost constant. This leads to the assumption, that the cells reduce only the uranyl(VI) lactate complex. This conclusion can be supported by the fact that the reduction process did not take place in bicarbonate buffer, where the uranyl(VI) carbonate complexes are dominant, using the same microorganism.

The comparison of the UV/VIS band positions of the dissolved cell pellets with the spectra of pure uranium(IV) and uranyl(VI) samples provides clear evidence of the formed uranium(IV). Furthermore, bands of uranyl(VI) occur in the spectrum, as well. Therefore, a combination of a sorption and reduction processes is assumed. These findings offer new insights into the microbe-actinide interactions relevant to high-level radioactive waste disposal in clay rock.

The authors gratefully acknowledge the funding provided by the German Federal Ministry of Education and Research (BMBF) (Grant 02NUK053E) and The Helmholtz Association (Grant SO-093).

References

[2] N. Matschiavelli et al., "The year-long development of microorganisms in uncompacted Bavarian bentonite slurries at 30 °C and 60 °C", Environ. Sci. Technol. 53, 10514–10524 (2019).

A. Bagnoud et al., "Reconstructing a hydrogen-driven microbial metabolic network in Opalinus Clay rock", Nat. Commun. 7, 1–10 (2016)

- [3] A. Vatsurina et al., "Desulfosporosinus hippei sp. nov., a mesophilic sulfate-reducing bacterium isolated from per-
- mafrost", Int. J. Syst. Evol. Microbiol. 58, 1228–1232 (2008).
 [4] P. Wersin et al., "Biogeochemical processes in a clay formation in situ experiment: Part A Overview, experimental design and water data of an experiment in the Opalinus Clay at the Mont Terri Underground Research Laboratory, Switzerland", Appl. Geochemistry 26, 931–953 (2011).

Porosity and pore network analysis of the sandy facies of Opalinus Clay host rock

T. Bollermann^a, C. Fischer^a

^aHelmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR), Inst. Of Resource Ecology, Reactive Transport Department, Leipzig, Germany

Key words: Opalinus Clay sandy facies, pore network, diffusive transport

Argillaceous formations are considered as potential host rocks for deep geological nuclear waste repositories because of their low permeability and high sealing capacity [1]. The Opalinus clay formation has been intensively studied as a potential candidate for hosting a radioactive waste disposal in Switzerland citearticle2. Different facies types of the Opalinus Clay rock have been identified. Recent studies are focusing on the sandy facies type with elevated concentrations of coarse-grained sedimentary components and newly-formed diagenetic minerals. A fundamental understanding of fluid transport mechanisms in the host rock is a prerequisite for long-term predictions of radionuclide transport. In low permeable argillaceous rock formations, the major transport mechanism for aqueous species is molecular diffusion [3]. We investigate the molecular diffusion properties of the sandy Opalinus Clay facies. This study includes two parts: First, a scale-crossing analytical approach is applied for the reconstruction of the critical pore network. A combination of micro-computed tomography (µCT), focused ion beam scanning electron microscope (FIB-SEM) imaging, and mercury intrusion porosimetry (MIP) techniques led to the reconstruction of a generalized pore network model. This geometry model is applied in numerical transport studies. Second, an experimental approach has been applied for imaging and quantification of the fluid flow velocity. We conducted positron emission tomography diffusion experiments by using Na-22 radiotracer for the analysis of the diffusive transport on the millimetre to decimetre length scale [4]. The results of this second analytical study are utilized for the validation of the numerical transport simulations.

- Marty, B., S. Dewonck, and C. France-Lanord, Geochemical evidence for efficient aquifer isolation over geological timeframes, Nature, 425(6953), 55-58 (2003).
- [2] Thury, M. and P. Bossart, The Mont Terri rock laboratory, a new international research project in a Mesozoic shale formation, in Switzerland., Engineering Geology, 52(3-4), 347-359 (1999).
- [3] Gimmi, T. and G. Kosakowski, How Mobile Are Sorbed Cations in Clays and Clay Rocks?, Environmental Science & Technology, 45(4), 1443-1449(2011).
- [4] Kulenkampff, J., et al., Quantitative experimental monitoring of molecular diffusion in clay with positron emission tomography, Solid Earth, 7(4), 1207-1215 (2016).

Reductive immobilization of 99 Tc(VII) by different crystalline phases of iron sulfide (FeS₂)

D. M. Rodríguez^a, N. Mayordomo^a, V. Brendler^a, K. Müller^a, D. Schild^b, T. Stumpf^a

^aInstitute of Resource Ecology, Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf, Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden, Germany

^bInstitute for Nuclear Waste Disposal, Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany

Key words: technetium, iron sulfide, immobilization

⁹⁹Tc is a fission product with a long half-life of 2.14×105 years. Its migration behaviour and bioavailability strongly depend on its speciation in aqueous solution and on its oxidation state. Under aerobic conditions, Tc mainly exists as pertechnetate, TcO₄, which is a highly water-soluble anion that does not significantly sorb on minerals or sediments, i.e. is considered inert and its groundwater migration is favoured. Under reducing conditions, Tc(VII) becomes Tc(IV), whose main species, TcO₂, is a solid with a low solubility product and, thus, its mobility decreases. As the presence of reductants like Fe2+ in the near-field of a nuclear waste repository is expected due to canister corrosion, several studies consider ⁹⁹Tc reductive immobilization by mineral containing reductant moieties, such as magnetite (Fe^{II}Fe₂^{III}O₄) or mackinawite (FeS) [1, 2], confirming the ⁹⁹Tc(VII) reduction and subsequent ⁹⁹Tc(IV) retention on the mineral surfaces.

Pyrite (cubic FeS₂) is a redox sensitive sulfur mineral that has been identified as a good sorbent for Tc(VII) from soil and groundwater in both the absence [3] and presence [4] of humic substances. Under repository conditions, iron sulfide will be formed as both pyrite and marcasite (orthorhombic FeS₂) as a result of corrosion processes and microbial action [5]. Moreover, iron sulfides are also accessory minerals in granitic and argillaceous rocks. Therefore, reliable data on ${}^{99}Tc(VII)$ retention by both minerals and their mixtures is relevant for the safe disposal of nuclear waste.

We have studied the Tc retention by pure pyrite and by a mixture marcasite-pyrite 60:40 (synthetic FeS₂) by a combination of batch experiments and spectroscopy (Raman microscopy, X-ray photoelectron spectroscopy and X-ray absorption spectroscopy). We have found that both minerals reduce Tc(VII) to Tc(IV). Pyrite removes 100% of Tc from solution within one day at pH \geq 5.5 whereas in the presence of marcasite the Tc uptake becomes slower (100% reached after 7 days at 6.0 < pH < 9.0) and incomplete (80% at pH 10). The spectroscopic analysis showed that at pH 6.0 the removal mechanism is the same in both systems: inner-sphere complexation between Tc(IV) dimers and hematite (Fe₂O₃) formed in the surface of the FeS₂. At pH 10.0 the retention mechanisms are different: Tc(IV) is incorporated into magnetite formed as secondary phase on the surface of pyrite. In the presence of marcasite, the formation of sulfate minerals suggests that the redox active species is S²⁻ instead of Fe²⁺, accounting for the slower and less efficient Tc scavenging.

This work has been developed in the frame of VESPA II project (02E11607B), supported by the German Federal Ministry of Economic Affairs and Energy (BMWi).

References

 Kobayashi, T., Scheinost, A. C., Fellhauer, D., Gaona, X. & Altmaier, M. Redox behavior of Tc(VII)/Tc(IV) under various reducing conditions in 0.1 M NaCl solutions. Radiochim. Acta 101, 323–332 (2013).

 [2] Livens, F. R. et al. X-ray absorption spectroscopy studies of reactions of technetium, uranium and neptunium with mackinawite. J. Environ. Radioact. 74, 211–219 (2004).

Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021

^[3] Huo, L., Xie, W., Qian, T., Guan, X. & Zhao, D. Reductive immobilization of pertechnetate in soil and groundwater using synthetic pyrite nanoparticles. Chemosphere 174, 456–465 (2017).

^[4] Bruggeman, C., Maes, A. & Vancluysen, J. The identification of FeS2 as a sorption sink for Tc(IV). Phys. Chem. Earth 32, 573–580 (2007).

- [5] Roberts, W. M. B., Walker, A. L. & Buchanan, A. S. The chemistry of pyrite formation in aqueous solution and its relation to the depositional environment. Miner. Depos. 4, 18–29 (1969).

THEREDA – Thermodynamic Reference Database for the nuclear waste disposal in Germany

F. Bok^a, H.C. Moog^b, M. Altmaier^c, D. Freyer^d, T. Thoenen^e

^aHelmholtz-Zentrum Dresden – Rossendorf, Institute of Resource Ecology, Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden, Germany

^bGesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)mbH, Theodor-Heuss-Straße 4, 38122 Braunschweig, Germany ^cKarlsruhe Institute of Technology, Institute for Nuclear Waste Disposal, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany

^d Institute for Inorganic Chemistry, TU Bergakademie Freiberg, Leipziger Str. 29, 09599 Freiberg, Germany ^ePaul Scherrer Institut, Laboratory for Waste Management, 5232 Villigen PSI, Switzerland

Key words: Thermodynamic database, Geochemical modelling, PITZER ion interaction approach

1. Introduction

The disposal of nuclear waste including the assessment of long-term safety is still an open question in Germany. In addition to the pending decision about the repository host rock (salt, granite, or clay) and the associated site selection, the basic necessity of a consistent and obligatory thermodynamic reference database persists. Such a database is essential to assess potential radionuclide migration scenarios accurately and to make well-founded predictions about the long-term safety up to one million years. Specific challenges are comprehensive datasets covering also elevated temperatures and high salinities. Concerning the required elements (actinides, fission products as well as matrix and building materials), no other thermodynamic database is available that is compatible with the expected conditions. Due to these deficiencies THEREDA [1, 2], a joint project of institutions leading in the field of safety research for nuclear waste disposal in Germany and Switzerland, was started in the year 2006.

2. Database features

THEREDA offers evaluated thermodynamic data for many compounds (solid phases, aqueous species, or constituents of the gaseous phase) of elements relevant according to the present state of research. In particular, all oxidation states expected for disposal site conditions are considered. In the present release, THEREDA includes data for actinides and their chemical analogues (Th, U, Np, Pu, Am, Cm & Nd), fission products (Se, Sr, Tc & Cs) and matrix elements (Na, K, Mg, Ca, Al, Si — Cl, SO₄, CO₃). For the calculation of cementitious phases the current version of CEMDATA (18.1) was integrated [3].

THEREDA is based on a relational databank whose structure intrinsically ensures the internal consistency of thermodynamic data. Data considered respond to the needs of both Gibbs Energy Minimizers (Chem-App, GEMS) and Law-of-Mass-Action codes (Geochemist's Workbench, PHREEQC, ToughReact). The database is designed generically so that it can store interaction parameters for various models. Namely, the PITZER ion interaction approach to describe activity coefficients of hydrated ions and molecules in saline solutions [4] as well as ideal and non-ideal solid solution approaches are considered in the actual dataset.

After free registration, THEREDA is accessible via internet through www.thereda.de. This is not only a portal to view the data itself, their uncertainties and the primary references of the data; it provides also additional information on issues concerning the database. Ready-to-use parameter files are available for download in a variety of formats (geochemical code specific formats and generic ASCII type). They are also used for internal test calculations – one essential element of the quality assurance scheme. The capabilities of THEREDA are demonstrated using approx. 400 application case calculations, whose results were compared with experimental values published in literature. An example is shown in Figure 1.



Figure 1: Solubility of amorphous uranium(IV) hydroxide in 1 m NaCl solution at T = 25 °C. Experimental data are taken from [5, 6, 7] (open symbols), calculation was done using THEREDA (red line), the uncertainty range is calculated from the error of the U(OH)₄(am) solubility constant [8] (grey line).

- Altmaier, M. et al., "THEREDA Ein Beitrag zur Langzeitsicherheit von Endlagern nuklearer und nichtnuklearer Abfälle", atw, 53, 249–253 (2008).
- [2] Moog, H.C. et al., "Disposal of nuclear waste in host rock formations featuring high-saline solutions Implementation of a thermodynamic reference database (THEREDA)", Appl. Geochem., 55, 72–84 (2015).
- [3] Lothenbach, B. et al., "Cemdata18: A chemical thermodynamic database for hydrated Portland cements and alkaliactivated materials", Cem. Concr. Res., 115, 472–506 (2019).
- [4] Pitzer, K.S., Activity Coefficients in Electrolyte Solutions, 2nd Ed., pp. 542, CRC Press, Boca Raton (1991).
- [5] Ryan, J. L., et al. "The solubility of uranium(IV) hydrous oxide in sodium hydroxide solutions under reducing conditions", Pol-yhedron, 2, 947 (1983).
- [6] Rai, D. et al. "The Solubility of Th(IV) and U(IV) Hydrous Oxides in Concentrated NaCl and MgCl2 Solutions" Radiochim. Acta, 79, 239–247 (1997).
- [7] Neck, V. et al. "Solubility and hydrolysis of tetravalent actinides", Radiochim. Acta, 89, 1-16 (2001).
- [8] Grenthe, I. et al. "Second Update on the Chemical Thermodynamics of Uranium, Neptunium, Plotonium, Americium and Technetium" pp. 1573, OECD Nuclear Energy Agency, Boulogne-Billancourt (2020).

Aufklärung des Korrosionsmechanismus von Eisen an der Eisen/Bentonit-Grenzfläche

S. Kaufhold^a

^aDie Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe

Key words: -

Die Barrierewirkung der meisten Granite ist gering. Aus diesem Grund wird in Ländern, die sich für die Endlagerung im Kristallin entschieden haben, eine zusätzliche geotechnische Barriere in Form von Bentonitformsteinen eingesetzt. Bentonitpulver oder -granulat wird dabei unter hohem Druck zu formstabilen Steinen gepresst, die um den Metallkanister herum platziert werden. Der Bentonit hat dort mehrere Funktionen. Er soll die hydraulische Leitfähigkeit reduzieren (hohen Quelldruck besitzen), Radionuklide sorbieren, eine ausreichende Wärmeleitfähigkeit besitzen und möglichst lange stabil sein unter den zu erwartenden Bedingungen. Alle Anforderungen wurden von Kaufhold & Dohrmann (2016) zusammengefasst. Die wichtigste Barriere stellt aber zunächst der Kanister da. In Bentonit-basierten Endlagern wird dessen Langzeitbeständigkeit von den Reaktionen abhängen, die an der Metall-Bentonitgrenzfläche stattfinden. In Schweden und Finnland ist geplant Kupfer einzusetzen, das mit dem Bentonit keine spezifischen Reaktionen eingeht, zumindest wenn der Bentonit kein Sulfid enthält (Kaufhold et al., 2017). An der Eisen-Bentonit-Grenzfläche wurden aber spezifische Reaktionen gefunden (Kaufhold et al., 2020a, b). Wenn Karbonate abwesend sind bildet sich Magnetit und ein Eisensilikat, wobei sich der Magnetit in der Regel zuerst bildet. Falls ausreichend reaktives Si im Bentonit vorhanden ist, z.B. als Opal-A, dann bildet sich das Eisensilikat auch direkt. Außerdem wurde eine Reduktion des strukturellen Fe^{3+} der Smektite sowie die Bildung von Wasserstoff beobachtet. Der pH-Wert steigt dabei nicht oberhalb von 11, so dass davon ausgegangen werden kann, dass die Smektite durch die Reduktion des strukturellen Fe^{3+} destabilisiert werden und somit als Si-Quelle für die weiterführenden Reaktionen zur Verfügung steht. Basierend auf zeitaufgelösten REM-Studien konnte beobachtet werden, dass die Korrosion innerhalb von Tagen anhand der Bildung eines Fe²⁺-gels an der Oberfläche des Eisens beginnt. Aus dieser bildet sich je nach Si-Verfügbarkeit entweder Magnetit oder Fe-Silikat (ein 2-Schichtsilikat, oftmals als "Berthierin" bezeichnet). Bei der Bildung des Fe²⁺-gels ("ferrous hydroxide") entsteht Wasserstoff, der das strukurelle Eisen der Smektite reduziert und diese somit destabilisiert ("reductive dissolution"). Dadurch steht wieder mehr Si zur Verfügung, das zur weiteren Bildung von Fe-Silikat verbraucht wird und die Korrosion somit begünstigt. Basierend auf den bisher vorhandenen Daten wird davon ausgegangen, dass die Korrosionsrate durch den Verbrauch von Wasserstoff bestimmt wird, also von der Reduktion des strukturellen Fe^{3+} der Smektite. Dabei ist bekannt, dass niedrig geladene Smektite leichter zu reduzieren sind (bzw. deren Fe^{3+}). Neben dem Wassergehalt und den austauschbaren Kationen, bestimmt also die Ladungsdichte der Smektite an der Grenzfläche die Korrosionsrate. Die Rolle von reaktivem Si bezüglich der Rate wird derzeit untersucht. Langzeitversuche, die in verschiedenen Laboren durchgeführt wurden, zeigen einheitliche Daten bezüglich der zeitlichen Entwicklung der Korrosionsrate. Anfangs wurden dabei Werte weit oberhalb von 10 µm/a gemessen. Nach mehreren Jahren sinkt diese aber auf Werte um 1 µm/a.

- Kaufhold, S., Dohrmann, R. (2016) Distinguishing between more and less suitable bentonites for storage of high-level radioactive waste. – Clay Minerals, 51, 289-302.
- Kaufhold, S., Dohrmann, R., Gröger-Trampe, J. (2017) Reaction of native copper in contact with pyrite and bentonite in anaerobic water at elevated temperature. – Corrosion Engineering Science and Technology, 52, 349 – 358
- [3] Kaufhold, S., Klimke, S., Schlömer, S., Alpermann, T., Renz, F., Dohrmann, R. (2020a) About the corrosion mechanism of metal iron in contact with bentonite. –Earth and Space Chemistry, doi.org/10.1021/acsearthspacechem.0c00005.
- [4] Kaufhold, S., Schippers, A., Marx, A., Dohrmann, R. (2020b) SEM study of the early stages of Fe-bentonite corrosion—The role of naturally present reactive silica. - Corrosion Science 171, 108716.

Simulation of multi-component diffusion and sorption of uranium through Opalinus Clay on the host rock scale

Theresa Hennig^{a,b}, Michael Kühn^{a,b}

^a GFZ German Research Centre for Geosciences, Fluid Systems Modelling, Telegrafenberg, 14473 Potsdam, Germany ^b University of Potsdam, Institute of Geosciences, Karl-Liebknecht-Str. 24-25, 14476 Potsdam-Golm, Germany

Key words: Facies, uranium speciation, sorption, reactive transport, heterogeneity, PHREEQC, Mont Terri, repository far-field

1. Introduction

Diffusion is the primary transport process in claystones, that are preferred host rocks for the geological storage of nuclear waste due to their low permeability and retardation of transport by sorption. Migration of radionuclides is quantified with numerical simulations usually following the single-component (SC) approach based on Fick's law using one diffusion coefficient for all species, major and minor ions as well as all radionuclides, in the same way. Multi-component (MC) diffusion simulations enable a process based and more precise approach to calculate transport and sorption compared to SC models. In the MC approach, each species in the system is assigned its own diffusion coefficient and transport is calculated separately for charged and uncharged regions present in the pore space of clay formations, like the porewater and the diffuse double layers (DDL) enveloping the clay mineral surfaces.

Due to the availability of a comprehensive database elaborated in the underground research laboratory Mont Terri (Switzerland), we use the Opalinus Clay as potential host rock in our simulations. The formation is subdivided into shaly, sandy and carbonate-rich facies deviating in their mineralogy and geochemical conditions in the porewaters as a result of the water rock interaction. We studied the migration of uranium, as one of the main components in spent fuel, by applying the MC approach for the far-field scale. Our first focus was to assess the deviation between the classical SC and the MC approach in the diffusion lengths of uranium. We know, that sorption processes of uranium are faciesdependent due to the variations in porewater chemistry [1]. Hence, we have investigated and quantified the dependence also for the MC diffusion approach. MC diffusion simulations are associated with a huge computational effort, especially on the host rock scale required for safety assessments of potential repositories. As a second focus, we therefore developed a workflow using MC simulations on the small scale to calibrate transport parameters, which are then used as surrogate of MC diffusion in the SC approach on the host rock scale for simulation times of up to one million years.

2. Methods and Results

We performed one-dimensional diffusion simulations using the MC approach implemented in the geochemical code PHREEQC [2]. In the model, the geochemical and mineralogical conditions in the facies of the Opalinus Clay are defined based on data from bore hole logs at Mont Terri [3]. First, we quantified the deviation between the MC approach and the SC method using Fick's law by comparing the calculated diffusion lengths on the metre-scale and thus for acceptable computing times (Figure 1). Second, we developed a workflow to calibrate and transfer results of MC diffusion simulations on the metre-scale to the host rock scale (far-field) and a simulation time of one million years. For that, we calculated a distribution coefficient K_d (m³/kg) from results of PHREEQC and calibrated an effective diffusion coefficient D_e (m²/s) by applying Fick's laws until the results coincide with the MC simulations.

The calculated diffusion lengths of the MC simulations deviated for all facies from the SC approach due to the interaction of the predominant uranium species, $CaUO_2(CO_3)_3^{2-}$, with the DDL (Figure 1).

Negatively charged surfaces repel anions from their DDL, what reduces their accessible pore space and thus diffusion. In contrast, positively charged surfaces enhances uranium migration. Uranium transport and sorption is dominated by high clay contents and the DDL. The behaviour and composition of the DDL are governed by the species concentrations and ionic strengths of the porewater as well as the surface charge of the clay minerals. Consequently, diffusive transport and sorption processes of uranium are facies-dependent [3]. With our workflow, we determined K_d and D_e and showed, that they can succesfully be applied to the host rock scale and required simulation times up to one million years, which accelerates the simulation time in the order of 10^4 . After a simulation time of one million years, uranium diffusion lengths ranged between between 10 m and 35 m. With respect to the minimum requirement of a thickness of 100 m, the Opalinus Clay seems to be a suitable host rock for nuclear waste repositories [3].



Figure 1: Concentration of uranium in the porewater of the shaly (a and c), carbonate-rich (b) and sandy facies (d) for the MC diffusion (MC, blue line) as well as the SC approach (SC, orange line). The red, dotted lines represent the results of the simulations based on the SC approach using the K_d and D_e calibrated from the MC simulations. The rRMSE indicates the deviation between the simulations with the calibrated parameters and the respective MC simulation. The number behind the shaly facies corresponds to the clay mineral content in wt.% at the sample location.

- Hennig T., Stockmann M., Kühn M., Simulation of diffusive uranium transport and sorption processes in the Opalinus Clay, Applied Geochemistry, 123, (2020)
- [2] Parkhurst, D. L. and Appelo, C. A. J, Description of input and examples for PHREEQC Version 3 A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport and inverse geochemical calculations, U.S. Geological Survey Techniques and Methods, submitted (2013)
- [3] Hennig T., Kühn M., Surrogate model for multi-component diffusion of uranium through Opalinus Clay on the host rock scale, Applied Sciences, submitted (2020)

The influence of the bentonite type on the corrosion of cast iron

V. Sushko^a, M. Dressler^a, S. Kluge^a, M. Matschiavelli^a, A. Schierz^a, T. Stumpf^a, A. Cherkouk^a

 $^{a} Helmholtz-Zentrum \ Dresden-Rossendorf, \ Bautzner \ Landstraße \ 400, \ 01328 \ Dresden \ - \ Germany$

Key words: corrosion, bentonite, SEM-EDX, microbial activity

1. Introduction

Bentonite is considered as buffer and sealing material in a multi-barrier system for a deep geologic repositories (DGR) of nuclear waste and spent fuel [1]. Another part of the engineered barrier system is the containment of the radioactive waste. Cast iron is often taking into account for the construction of the containers as a candidate material [2]. But the cast iron components are fairly unstable, can corrode to insoluble corrosion products and react with the bentonite buffer matrix. Anaerobic corrosion together with microbially influenced corrosion will be dominant forms of corrosion in a DGR and the interactions at the metal/bentonite interface determine the long-term performance of bentonite-based radioactive waste barriers [3]. The aim of the current study was to evaluate the effect of different bentonites and their inherent microbial potential on the corrosion of cast iron.

2. Results

Three types of bentonite (B25, Calcigel, MX-80) were chosen for the setup of mesocosm-experiments as described in [4]. All three bentonites have different smectite content and an indigenous microbial community. The mesocosms with cast iron coupons, artificial Opalinus Clay porewater and bentonite were incubated in N_2/CO_2 atmosphere for 271 days at 30 °C. Some of the mesocosms were supplemented with 5 mM sodium lactate and hydrogen (to a 0.5 bar of total pressure) to stimulate microbial activity. After the incubation period the content of the mesocosms was divided and subjected to different analysis, including geochemical analysis (as e.g. ICP-MS, ion and high-performance liquid chromatography), DNA isolation and amplification of the intergenic spacer to indicate the microbial community differences, SEM-EDX and RAMAN spectroscopy to characterize the surface structure of the cast iron coupons.

Black precipitates were visible in Calcigel mesocosms containing lactate and MX-80 mesocosms containing lactate or hydrogen. The obtained geochemical data confirmed the differences in the different mesocosms by demonstrating unequal levels of sulphate and lactate consumption that might be due to different microbial activities in the here analysed bentonites. Indeed, depending on the used bentonite and applied conditions, a different microbial community structure was observed by ribosomal intergenic spacer analysis (RISA). Moreover, surface analysis of the cast iron coupons showed that resulted corrosion and metabolite accumulation are also dependent on the bentonite type. Therefore, the used bentonites varied with respect to reactivity and microbial activity.

Overall, the results show the importance of selection of suitable bentonite for DGR to adjust microbial implications and possibly faster corrosion rate of the metal containers.

We acknowledge funding by the BMBF (Grant 02NUK053B) and HGF (Grant SO-093).

References

 P. Sellin and etc., The Use of Clay as an Engineered Barrier in Radioactive-Waste Management – A Review, Clays and Clay Minerals 61(6), pp. 477-498 (2014).

- [2] F. King, Container Materials for the Storage and Disposal of Nuclear Waste, Corrosion 69(10), pp. 986-1011 (2013).
- [2] F. Kuig, Container Matchias for the Storage and Disposal of Nuclear Waste, Contosion 05(10), pp. 560-1011 (2015).
 [3] S. Kaufhold and etc., About the Corrosion Mechanism of Metal Iron in Contact with Bentonite, ACS Earth Space Chem. 4, 5, pp. 711–721 (2020).
 [4] N. Matschiavelli and etc., The Year-Long Development of Microorganisms in Uncompacted Bavarian Bentonite Slurries at 30 and 60 °C, Environ. Sci. Technol., 53, 17, 10514–10524 (2019)

Mineral Dissolution Rates: Importance of Surface Reactivity

J. Schabernack^a, C. Fischer¹

^aDepartment of Reactive Transport, Institute of Resource Ecology, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Germany

Key words: Reactive Transport Model, Mineral Dissolution, Crystal Surface Reactivity

1. Abstract

Mineral dissolution plays a key role in many environmental and technical fields, e.g., weathering, building materials, as well as host rock characterization for potential nuclear waste repositories. The rate of mineral dissolution in water is controlled by two parameters: (1) transport of dissolved species over and from the interface determined by advective fluid flow and diffusion (transport control) and (2) crystal surface reactivity (surface reactivity control). Current reactive transport models (RTM) simulating species transport commonly calculate mineral dissolution by using rate laws [1]. These rate laws solely depend on species concentration in the fluid and therefore do not include intrinsic variability of surface reactivity. Experimental studies under surface-controlled conditions have shown a heterogeneous distribution of reaction rates [2]. This rate heterogeneity is caused by nanotopographical structures on the crystal surface, such as steps and etch pits that are generated at lattice defects. At these structures, the high density of reactive kink sites is leading to a local increase in dissolution rates.

In this study, we test whether experimentally observed rate heterogeneities can be reproduced by using current RTMs. We apply a standard RTM approach combined with the measured surface topography of a calcite single crystal [2]. Calcite is one of the larger mineral components in the sandy facies of the Opalinus clay formation, that is under consideration for nuclear waste storage. The calculated surface dissolution rate maps are compared to experimentally derived rate maps. The results show that the measured rate heterogeneities cannot be reproduced with the existing RTM approach. To improve the predictive capabilities of RTMs, the surface reactivity that is intrinsic to the mineral needs to be implemented into rate calculations. Investigating calcite surface reactivity in the context of dissolution can also yield information about other kinetic surface processes such as the adsorption of radionuclides. We discuss parameterization of surface reactivity via proxy parameters, such as surface roughness or surface slope. The implementation of these proxy parameters will allow for a more precise prediction of host rock-fluid interaction over large time scales in RTMs, relevant for safety assessment.



Figure 1: Image A shows the surface topography of an etch pit on the (10-14) calcite face. The bottom images show the dissolution rates of surface (A) obtained from experiment (B) and current reactive transport model calculations (C).

Tage der Standortauswahl, Freiberg, 11. & 12.02.2021

- P. Agrawal, A. Raoof, O. Iliev and M. Wolthers, Evolution of pore-shape and its impact on pore conductivity during CO2 injection in calcite: Single pore simulations and microfluidic experiments, Advances in Water Resources, 136, 103480 (2020).
- [2] I. Bibi, R.S. Arvidson, C. Fischer and A. Luttge: Temporal Evolution of Calcite Surface Dissolution Kinetics, Minerals, 8, 256 (2018).