





**COLENCO AG BADEN/SCHWEIZ  
UND  
INTERA TECHNOLOGIES, INC.  
AUSTIN, TEXAS USA**

## **SCHACHTANLAGE KONRAD, SALZGITTER**

### **Modellrechnungen zur Gasausbreitung im Gebirge**

**Auftrags-Nr. 9K 352126.44**

29. November 1989



Der Bericht wurde im Auftrag der PHYSIKALISCH-TECHNISCHEN BUNDESANSTALT (PTB) erstellt. Die PTB behält sich alle Rechte vor. Insbesondere darf dieser Bericht nur mit Zustimmung der PTB zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt bzw. Dritten zugänglich gemacht werden.

INHALTSVERZEICHNIS

	<u>Seite</u>
1 <b>EINLEITUNG</b> . . . . .	1
1.1 <b>Zielsetzung</b> . . . . .	1
1.2 <b>Vorgehen</b> . . . . .	1
1.3 <b>Aufbau des Berichtes</b> . . . . .	3
2 <b>PROGRAMMBESCHREIBUNG</b> . . . . .	4
2.1 <b>Grundgleichungen</b> . . . . .	4
2.2 <b>Lösung mit Finiten Differenzen</b> . . . . .	6
2.3 <b>Kenngrößen von Gestein, Flüssigkeit und Gas</b> . . . . .	9
2.4 <b>Modellannahmen</b> . . . . .	10
3 <b>BESCHREIBUNG DES MODELLS</b> . . . . .	12
3.1 <b>Eigenschaften von Gestein, Wasser und Gas</b> . . . . .	13
3.2 <b>Diskretisierung</b> . . . . .	15
3.3 <b>Anfangs- und Randbedingungen, Quellterm</b> . . . . .	16
3.4 <b>Sensitivitätsanalyse</b> . . . . .	18
3.4.1 <b>Modelllänge</b> . . . . .	18
3.4.2 <b>Anfangsbedingungen</b> . . . . .	18
3.4.3 <b>Duale Porosität</b> . . . . .	20
3.4.4 <b>Permeabilität des Oxford</b> . . . . .	20
3.4.5 <b>Kapillardruck</b> . . . . .	20
3.4.6 <b>Gasproduktionsrate</b> . . . . .	21
4 <b>ERGEBNISSE</b> . . . . .	22
4.1 <b>Referenzfall</b> . . . . .	22
4.2 <b>Variation der Modelllänge</b> . . . . .	27

4.3	Variation der Anfangsbedingungen . . . . .	28
4.4	Modellierung der dualen Porosität . . . . .	29
4.5	Variation der Permeabilität des Oxford . . . . .	30
4.6	Variation des Kapillardruckes . . . . .	30
4.7	Variation der Gasproduktionsrate . . . . .	31
5	SCHLUSSFOLGERUNGEN . . . . .	32
	LITERATURVERZEICHNIS . . . . .	36
	TABELLEN . . . . .	38
	ABBILDUNGEN . . . . .	41

## 1 EINLEITUNG

Durch physikalisch-chemische Vorgänge in und an den Abfallgebinden entstehen nach Verschluss des Endlagers und Zutritt von Formationswässer ins Endlagergebäude über eine längere Zeitperiode Gase, vorwiegend Wasserstoff, welche für die Endlagerung von sicherheitstechnischer Bedeutung sein können. Der weitaus grösste Teil der Gase entsteht durch Korrosion von Eisen und Stahl, welches eingelagert oder für den Ausbau des Endlagers verwendet wurde.

Der vorliegende Bericht beschreibt die Durchführung und die Resultate von instationären Simulationsrechnungen mit einem geometrisch vereinfachten, zweidimensionalen Modell des geplanten Endlagers und dessen Umgebung. Ziel der Rechnungen ist, den Druckaufbau und die Beeinflussung der Grundwasserströmung durch die entstehenden Gase zu untersuchen.

Die Modellrechnungen wurden durch die Firma INTERA Technologies, Inc., Austin, Texas USA im Unterauftrag der Firma COLENCO AG, Baden/Schweiz durchgeführt. Die Spezifikation der Modellrechnungen, die Koordination der Arbeiten mit gleichzeitig durchgeführten hydrogeologischen Modellierungsarbeiten und die Übersetzung des Berichtes ins Deutsche erfolgte durch COLENCO AG.

### 1.1 Zielsetzung

Zielsetzung der Modellrechnungen ist, die Auswirkungen der vorwiegend durch Korrosion im Endlager entstehenden Gase quantitativ zu ermitteln und zu beurteilen. Insbesondere werden folgende Fragen untersucht:

- Druckanstieg innerhalb und in der Umgebung des Endlagers als Folge der Gasproduktion
- Ausbreitung der Gase in der Lagerumgebung, resultierende Gaskonzentrationen in den Formationswässern (gelöst) und in Gasphase
- Beeinflussung der Grundwasserströmung durch die Entstehung und die Ausbreitung der Gase

### 1.2 Vorgehen

Die Schachtanlage Konrad besteht seit rund 30 Jahren. Bis zum Verschluss des geplanten Endlagers wird das System der abgeteufelten Schächte und aufgefahrenen Strecken und Kammern während rund 70 Jahren eine ausgedehnte Drucksenke im tiefen Grundwasserfluss darstellen, welche durch Bewetterung und Abpumpen der geringen Mengen zufließender Formationswässer auf Atmosphärendruck gehalten wird. In unmittelbarer Umgebung der Grube beträgt die Druck-

absenkung gegenüber dem hydrostatischen Gleichgewichtsdruck rund 100 bar. Während der rund 70-jährigen Betriebszeit der Erzgrube und des Endlagers dehnt sich der Absenktrichter über grössere Distanzen ins Wirtgestein und die Nebengesteine im Liegenden und Hangenden aus. Durch die Bewetterung können gewisse Bereiche der unmittelbaren Grubenumgebung ungesättigt werden.

Nach dem Verschluss des Endlagers wird die Atmosphärenbedingung nicht länger technisch aufrechterhalten. Durch zuströmendes Formationswasser wird das Endlager langsam geflutet. Etwas verzögert setzt, vorwiegend infolge von Korrosion, die Gasproduktion ein. Beide Prozesse bewirken einen Anstieg des Druckes im Endlager und schliesslich in der gesamten Grubenumgebung. Für die Modellierung wird angenommen, dass die Verhältnisse unmittelbar vor dem Verschluss des Endlagers bezüglich Druckverteilung die Anfangsbedingungen darstellen, dass das Grubengebäude rasch (instantan) geflutet wird und die Gasproduktion sofort mit der vollen Rate einsetzt. Die beim Verschluss des Endlagers im Resthohlraumvolumen eingeschlossene Luft wird vernachlässigt. Sie wird zum Teil durch die anfänglich aeroben Korrosionsvorgänge aufgebraucht und zum anderen Teil, wie zunächst das produzierte Gas, im zuströmenden Wasser gelöst. Die Menge der eingeschlossenen Luft entspricht dem während etwas mehr als 30 Jahren produzierten Gasvolumen.

Die Modellierung des Druckaufbaus und der Gasausbreitung in wassergesättigtem oder teilgesättigtem Gestein erfordert den Einsatz eines 2-Phasenmodells. Ein 1-Phasenmodell für teilgesättigte Verhältnisse beschreibt nur die Druckverteilung und den Fluss der flüssigen Phase während für die Gasphase überall und jederzeit Gleichgewichtsbedingungen im Gravitationsfeld angenommen werden. Demgegenüber wird in einem 2-Phasenmodell der Gasfluss ebenfalls simuliert. Die im folgenden beschriebenen Modellrechnungen wurden mit dem Mehrphasenprogramm ECLIPSE 100 durchgeführt. Dieses Programm berechnet die Bewegung von 3 Phasen in 3 Dimensionen, wobei für das folgende nur 2 Phasen und 2 Dimensionen verwendet werden. Es beruht auf einer Erweiterung des Fliessgesetzes von Darcy von einer Phase auf mehrere Phasen und berücksichtigt die unterschiedliche Mobilität der verschiedenen Phasen sowie die Lösung von Gas in der wässrigen Phase.

Die Modellrechnungen werden für einen vertikalen, ungefähr Süd-Nord verlaufenden Schnitt durchgeführt, welcher in geometrischer Vereinfachung das Endlager und die Schichten Oxford und Kimmeridge (Oberjura) enthält. Die Hangendgrenze des Kimmeridge und die Liegendgrenze des Oxford werden als undurchlässig angenommen, da die  $k_f$ -Werte der angrenzenden Schichten um Grössenordnungen geringer sind als jene der betrachteten Schichten. An den vertikalen Grenzen im Süden und im Norden werden entsprechend dem grossräumigen, Süd-Nord gerichteten hydraulischen Gradienten hydrostatische Druckverteilungen vorgegeben. Am südlichen Modellrand gilt zusätzlich die Bedingung, dass weder Wasser noch Gas aus dem Modell abfliessen können.

Standortspezifische Werte sind nur für einen Teil der erforderlichen Modellparameter verfügbar. Wo keine Standortdaten vorliegen, werden Daten für vergleichbare Gesteine der Literatur entnommen. Der Einfluss von unsicheren oder möglicherweise sensitiven Parametern wird mit Hilfe einer Sensitivitätsanalyse untersucht.

### 1.3 Aufbau des Berichtes

Kapitel 2 enthält die Beschreibung des Mehrphasenprogramms ECLIPSE 100, die theoretischen Grundlagen, dynamischen Gleichungen, numerischen Näherungen und wichtigsten Annahmen.

In Kapitel 3 ist das Modell beschrieben. In verschiedenen Abschnitten werden der geometrische Modellaufbau und die Diskretisierung, die Gesteinseigenschaften, die Eigenschaften der beiden betrachteten Phasen sowie die Anfangs- und Randbedingungen beschrieben. Zudem wird der Rahmen der Sensitivitätsanalyse umrissen. Sie umfasst die Modellausdehnung, Anfangsbedingung, duale Porosität, Durchlässigkeit und Kapillardruck des Wirtgesteins sowie Gasproduktionsrate.

Die Resultate sind in Kapitel 4 dargestellt und diskutiert. Abschnitt 4.1 enthält den Referenzfall, die folgenden Abschnitte die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse.

Kapitel 5 schliesslich enthält die Schlussfolgerungen.

## 2 PROGRAMMBESCHREIBUNG

ECLIPSE 100 löst ein System von gekoppelten Differential- und gewöhnlichen Gleichungen, welche den Fluss von drei Phasen durch ein poröses oder geklüftetes Medium beschreiben. Da in den folgenden Modellrechnungen nur 2 Phasen betrachtet werden, kann sich die Diskussion auf das etwas einfachere 2-Phasensystem beschränken. Die zwei Phasen können durch eine Gas- und eine flüssige Phase (z.B. Wasser) oder durch zwei nicht mischbare flüssige Phasen (z.B. Wasser und ein organisches Lösungsmittel) gebildet werden. Beide Phasen können überall im Medium vorliegen. Klüftige Medien werden durch ein duales Fließsystem, ein primäres und ein sekundäres System, modelliert, wobei entweder das Konzept der dualen Porosität oder jenes der dualen Konduktivität gewählt werden kann. In beiden Darstellungen werden Bereiche der primären und solche der sekundären Porosität unterschieden. In der Darstellung mittels der dualen Porosität kommuniziert jeder Bereich der sekundären Porosität nur mit einem Bereich der primären Porosität und nur die Bereiche der primären Porosität sind untereinander voll verbunden. Im Konzept der dualen Konduktivität kommunizieren auch die Bereiche der sekundären Porosität untereinander.

Die bestimmenden Gleichungen sind in Abschnitt 2.1 aufgeführt. Die für die Lösung der Gleichungen verwendete Methode der Finiten Differenzen wird in Abschnitt 2.2 dargestellt. Die Gleichungen und die numerischen Näherungen für ihre Lösung sind Stand der Technik für die Simulation von Öl- und Gasvorkommen und werden zusätzlich in [1a,1b,1c] beschrieben. In Abschnitt 2.3 sind die Gleichungen der Gesteins- und Phaseneigenschaften aufgeführt. Abschnitt 2.4 enthält eine Zusammenfassung der verwendeten Modellannahmen.

### 2.1 Grundgleichungen

Die Grundgleichungen, welche den Fluss der beiden Phasen beschreiben, beruhen auf der Massenerhaltung und der Verallgemeinerung des Gesetzes von Darcy. Der gesamte Massenfluss in ein Kontrollvolumen ist gleich der Änderung der Masse innerhalb dieses Volumens.

Die Gleichung der Massenerhaltung für Wasser in einem porösen oder geklüfteten Medium lautet:

$$-\operatorname{div}(\rho_w \cdot \underline{u}_w) - q_w = \frac{\delta}{\delta t} (\phi \cdot \rho_w \cdot s_w) \quad (1)$$

Gas kann sowohl in der Gasphase als auch gelöst in der flüssigen Phase vorliegen. Die Gleichung für die Massenerhaltung der Gaskomponente enthält entsprechend mehr Terme:

$$\begin{aligned}
 - \operatorname{div} (R_S \cdot \rho_W \cdot \underline{u}_W + \rho_G \cdot \underline{u}_G) - q_G - R_S \cdot q_W = \\
 \frac{\delta}{\delta t} [\phi \cdot (R_S \cdot \rho_W \cdot s_W + \rho_G \cdot s_G)] \quad (2)
 \end{aligned}$$

wobei

$\rho_W, \rho_G$	Dichte von Wasser bzw. Gas
$\underline{u}_W, \underline{u}_G$	Filtergeschwindigkeit von Wasser bzw. Gas
$s_W, s_G$	Wasser- bzw. Gassättigung
$q_W, q_G$	Quelle oder Senke für Wasser bzw. Gas
$R_S$	Konzentration des gelösten Gases im Porenwasser (Massenverhältnis)
$\phi$	Porosität
$t$	Zeit

Unterstrichene Größen bezeichnen Vektorfelder. In der Gleichung für Wasser, Gl. (1), beschreibt der erste Term der linken Seite den konvektiven Fluss und der zweite Term lokale Quellen und Senken. Die rechte Seite ist die Änderung des lokalen Wassergehaltes, wobei sowohl die Porosität, die Dichte als auch die Sättigung zeitlich veränderlich sein können. Der Term in der Klammer auf der linken Seite der Gasgleichung beschreibt den konvektiven Gasfluss, welcher sich aus dem Fluss des gelösten Gases mit dem Wasser und dem Fluss in der Gasphase zusammensetzt. Der zweite und dritte Term auf der linken Seite beschreiben Quellen und Senken von Gas in Gasphase und in gelöster Phase. Die rechte Seite beschreibt wiederum die zeitliche Änderung der Gaskonzentration, welche sich aus dem gelösten und gasförmigen Anteil zusammensetzt. Die Konzentration des gelösten Gases im Porenwasser  $R_S$  ist begrenzt durch die Löslichkeit des Gases,  $R_{SM}$ , welche ihrerseits eine Funktion des Druckes der flüssigen Phase ist. Freies Gas, d.h. eine Gasphase kann nur existieren, falls das Wasser vollständig gasgesättigt ist.

Die Beziehung zwischen Filtergeschwindigkeit und Druckfeld wird durch eine Verallgemeinerung des Darcy'schen Gesetzes gegeben:

$$\underline{u}_W = - \frac{k \cdot k_{rW}}{\mu_W} \operatorname{grad} (p_W - \rho_W \cdot g \cdot h) \quad (3)$$

$$\underline{u}_G = - \frac{k \cdot k_{rG}}{\mu_G} \operatorname{grad} (p_G - \rho_G \cdot g \cdot h) \quad (4)$$

wobei

$k$	Permeabilität des Gesteins (für anisotrope Medien ist $k$ der Permeabilitätstensor)
$p_W, p_G$	Druck der Wasser- bzw. Gasphase
$k_{rW}, k_{rG}$	Relative Durchlässigkeit für Wasser bzw. Gas

$\mu_w, \mu_g$  Dynamische Viskosität von Wasser bzw. Gas  
 $h$  Tiefe bezogen auf eine Nullhöhe  
 $g$  Gravitationskonstante

Werden die Gleichungen (3) und (4) in die Gleichungen (1) und (2) eingesetzt, ergibt sich

$$\operatorname{div} \left[ k \frac{k_{rw} \cdot \rho_w}{\mu_w} \operatorname{grad} (p_w - \rho_w \cdot g \cdot h) \right] - q_w = \frac{\delta}{\delta t} (\phi \cdot \rho_w \cdot s_w) \quad (5)$$

$$\operatorname{div} \left[ R_s \cdot k \frac{k_{rw} \cdot \rho_w}{\mu_w} \operatorname{grad} (p_w - \rho_w \cdot g \cdot h) + \right. \\ \left. k \frac{k_{rg} \cdot \rho_g}{\mu_g} \operatorname{grad} (p_g - \rho_g \cdot g \cdot h) \right] - q_g - R_s \cdot q_w = \\ \frac{\delta}{\delta t} (\phi \cdot R_s \cdot \rho_w \cdot s_w) + \frac{\delta}{\delta t} (\phi \cdot \rho_g \cdot s_g) \quad (6)$$

Die Gleichungen (5) und (6) werden gleichzeitig unter Berücksichtigung der unten aufgeführten Beziehungen gelöst.

Die partiellen Differentialgleichungen (5) und (6) beschreiben den Fluss von Wasser und Gas in einem porösen oder geklüfteten Medium. Die Unbekannten in den beiden Gleichungen sind  $p_w, p_g, s_w, s_g$  und  $R_s$ . Die Kopplung der Gleichungen stellen die folgenden algebraischen Beziehungen her:

$$P_c = p_g - p_w \quad (7)$$

$$s_w + s_g = 1 \quad (8)$$

$$R_s \leq R_{sm} = f(p_w) \quad (9)$$

Der Kapillardruck  $P_c$  ist als Differenz der Drücke in der nichtnetzenden und der netzenden Phase definiert. Die Löslichkeit des Gases im Wasser  $R_{sm}$  wird als eine Funktion des Wasserdruckes allein angesetzt. Die relativen Durchlässigkeiten  $k_{rw}$  und  $k_{rg}$  und der Kapillardruck  $P_c$  werden als eindeutige Funktionen der Sättigung  $s_w$  und  $s_g$  dargestellt.

## 2.2 Lösung mit Finiten Differenzen

Die Lösung eines Systems von partiellen Differentialgleichungen mit der Methode der Finiten Differenzen beinhaltet die folgenden Schritte:

- Unterteilung des räumlichen Modellgebietes in (quaderförmige) Elemente und der Zeit in Zeitschritte (für transiente Probleme)
- Festlegen der Randbedingungen
- Festlegen der Anfangsbedingungen (für transiente Probleme)
- Formulieren der Gleichungen für die zeitlichen Änderungen aller Grössen in jedem Element in der Näherung der Finiten Differenzen
- Lösen der resultierenden gekoppelten, algebraischen Gleichungen

Die entsprechenden Gleichungen in der Näherung der Finiten Differenzen entsprechen konzeptuell der Massenbilanz für Gas und Wasser für jedes Element des Finite-Differenzen-Netzes.

Die Elimination der Unbekannten  $p_w$  und  $s_w$  in den Gleichungen (5) und (6) mit Hilfe der Gleichungen (7) und (8) und die Umformulierung in eine Finite-Differenzen-Gleichung ergibt

$$\Delta [T_w \cdot \Delta(p_g - p_c - \rho_w \cdot g \cdot h)] - Q_w = V_b \frac{\delta}{Dt} [\phi \cdot \rho_w \cdot (1 - s_g)] \quad (10)$$

$$\Delta [R_s \cdot T_w \cdot \Delta(p_g - p_c - \rho_w \cdot g \cdot h) + T_g \cdot \Delta(p_g - \rho_g \cdot g \cdot h)] - Q_g - R_s \cdot Q_w = V_b \frac{\delta}{Dt} [R_s \cdot \phi \cdot \rho_w \cdot (1 - s_g) + \phi \cdot \rho_g \cdot s_g] \quad (11)$$

In diesen beiden Gleichungen sind

$Q_w, Q_g$	Zu- und Abflussraten für Wasser bzw. Gas pro Element
$T_w, T_g$	Transmissibilität für Wasser bzw. Gas der Elementseitenflächen
$\Delta$	Operator zur Bildung der räumlichen Differenzen gemäss $\Delta_{i+\frac{1}{2}}\phi = \phi_i - \phi_{i+1}$ für jede Unbekannte $\phi$
$\delta$	Operator zur Bildung der zeitlichen Differenz gemäss $\delta\phi = \phi^{n+1} - \phi^n$ für jede Unbekannte $\phi$
$Dt$	Zeitschritt
$V_b$	Gesamtvolumen (bulk volume) des Elementes

Das Gesamtvolumen eines Elementes ist bei kartesischer Geometrie

$$V_b = Dx \cdot Dy \cdot Dz \quad (12)$$

wobei  $Dx, Dy$  und  $Dz$  die Dimensionen des Elementes sind.

Alle oben aufgeführten Grössen sollten mit den Indizes  $i, j, k$  versehen sein, welche die Koordinate des Elementes im Raum bezeichnen (z.B.  $V_{b,i,j,k}$  anstelle von  $V_b$ ,  $\phi_{i,j,k}$  anstelle von  $\phi$ ,  $Dx_{i,j,k}$  anstelle von  $Dx$  etc). Die Wirkung des Operators  $\Delta$  ist

ausgeschrieben

$$\begin{aligned} \Delta [T_w \cdot \Delta(p_w^{n+1})] &= \Delta_x [T_{wx}^{n+1} \cdot \Delta_x(p_w^{n+1})] + \\ &\quad \Delta_y [T_{wy}^{n+1} \cdot \Delta_y(p_w^{n+1})] + \\ &\quad \Delta_z [T_{wz}^{n+1} \cdot \Delta_z(p_w^{n+1})] \end{aligned} \quad (13)$$

wobei der erste Term wie folgt zu indizieren ist

$$\begin{aligned} \Delta_x [T_{wx} \cdot \Delta_x(p_w)]_{i,j,k} &= T_{w;i-\frac{1}{2},j,k} \cdot (p_{w;i-1,j,k} - p_{w;i,j,k}) - \\ &\quad T_{w;i+\frac{1}{2},j,k} \cdot (p_{w;i,j,k} - p_{w;i+1,j,k}) \end{aligned} \quad (14)$$

Die Definition der Transmissibilität T in den Finite-Differenzengleichungen zeigt folgendes Beispiel

$$T_{w;i+\frac{1}{2},j,k} = \left[ \frac{Dy \cdot Dz}{Dx} \right]_{i+\frac{1}{2},j,k} \cdot \left[ \frac{k_{xx} \cdot k_{rw}}{\mu_w} \cdot \rho_w \right]_{i+\frac{1}{2},j,k} \quad (15)$$

wobei die Permeabilität als tensorielle Grösse mit den Hauptachsen entlang den Koordinatenachsen angenommen wird.  $k_{xx}$  ist die Permeabilität entlang der x-Achse. Für die in der zweiten Klammer auftretenden Grössen werden gewichtete Mittelwerte der Elemente  $i, j, k$  und  $i+1, j, k$  verwendet. Die Permeabilität wird harmonisch gemittelt, während die relativen Durchlässigkeiten durch rückwärtsgerichtete Extrapolation bestimmt werden:

$$T_{w;i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{2 \cdot Dy_j \cdot Dz_k}{\left[ \frac{Dx}{k_{xx}} \right]_{i,j,k} + \left[ \frac{Dx}{k_{xx}} \right]_{i+1,j,k}} \cdot k_{rw;m,j,k} \cdot \left[ \frac{\rho_w}{\mu_w} \right]_{i+\frac{1}{2},j,k} \quad (16)$$

mit

$$m = \begin{cases} i & \text{für einen Fluss vom Element } i, j, k \text{ nach } i+1, j, k \\ i+1 & \text{für einen Fluss vom Element } i+1, j, k \text{ nach } i, j, k \end{cases}$$

Das Programm verwendet eine voll implizite Lösungsmethode, d.h. in den algebraischen Gleichungen werden für alle Grössen die Werte zum neuen Zeitpunkt verwendet. Dies wird durch eine Linearisierung der nichtlinearen Teile der partiellen Differentialgleichungen nach dem iterativen Newton-Raphson-Verfahren erreicht und betrifft die Bestimmung des Kapillardruckes und der relativen Durchlässigkeiten zu den neuen Zeitpunkten.

### 2.3 Kenngrößen von Gestein, Flüssigkeit und Gas

Das Programm berücksichtigt die Löslichkeit des Gases in der flüssigen Phase. Es wird angenommen, dass beide Phasen eine konstante Temperatur aufweisen und im thermodynamischen Gleichgewicht sind.

Die Dichten der beiden Phasen werden in Bezug zu ihren Dichten bei Referenzbedingungen dargestellt. Die Akkumulationsterme, d.h. die Terme, welche die Änderung des lokalen Wasser- und Gasgehaltes beschreiben und die rechten Seiten der Gleichungen (1) und (2) bilden, können wie folgt umgeformt werden:

Wasser:

$$\frac{\delta(\phi \cdot \rho_w \cdot s_w)}{\delta t} = s_w \cdot \rho_w \frac{\delta \phi}{\delta t} + s_w \cdot \phi \frac{\delta \rho_w}{\delta t} + \rho_w \cdot \phi \frac{\delta s_w}{\delta t} \quad (17)$$

Gas:

$$\begin{aligned} \frac{\delta(\phi \cdot \rho_w \cdot s_w \cdot R_s + \phi \cdot \rho_g \cdot s_g)}{\delta t} = \\ s_w \cdot R_s \cdot \rho_w \frac{\delta \phi}{\delta t} + s_w \cdot R_s \cdot \phi \frac{\delta \rho_w}{\delta t} + \rho_w \cdot \phi \frac{\delta(s_w \cdot R_s)}{\delta t} + \\ s_g \cdot \rho_g \frac{\delta \phi}{\delta t} + s_g \cdot \phi \frac{\delta \rho_g}{\delta t} + \rho_g \cdot \phi \frac{\delta s_g}{\delta t} \end{aligned} \quad (18)$$

Die Kompressibilität von Gestein und Wasser kann für die meisten Bedingungen als konstant angenommen werden. Dies entspricht einer linearen Abhängigkeit von Porosität und Wasserdichte vom Druck.

Die Kompressibilität von Gestein und Wasser werden wie folgt definiert

$$c_R = \frac{1}{\phi^0} \frac{\delta \phi}{\delta p} \quad (19)$$

$$c_w = \frac{1}{\rho_w^0} \frac{\delta \rho_w}{\delta p} \quad (20)$$

Mit Hilfe von

$$\frac{\delta\phi}{\delta t} = \frac{\delta\phi}{\delta p} \cdot \frac{\delta p}{\delta t}$$

erhält man

$$\frac{\delta(\phi \cdot \rho_w \cdot s_w)}{\delta t} = (s_w \cdot \rho_w \cdot \phi^0 \cdot c_R + s_w \cdot \phi \cdot \rho_w^0 \cdot c_w) \frac{\delta p_w}{\delta t} + \rho_w \cdot \phi \frac{\delta s_w}{\delta t} \quad (21)$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\delta(\phi \cdot \rho_w \cdot s_w \cdot R_S + \phi \cdot \rho_g \cdot s_g)}{\delta t} &= (\rho_w \cdot s_w \cdot R_S + \rho_g \cdot s_g) \cdot \phi^0 \cdot c_R \frac{\delta p_w}{\delta t} + \\ &s_w \cdot R_S \cdot \phi \cdot \rho_w^0 \cdot c_w \frac{\delta p_w}{\delta t} + \phi \cdot \rho_w \frac{\delta(s_w \cdot R_S)}{\delta t} + s_g \cdot \phi \frac{\delta \rho_g}{\delta p_g} \frac{\delta p_g}{\delta t} + \rho_g \cdot \phi \frac{\delta s_g}{\delta t} \end{aligned} \quad (22)$$

Die Dichte des Gases braucht keine lineare Funktion des Druckes zu sein. Die Viskosität der flüssigen Phase wird als reine Funktion des Druckes angenommen.

## 2.4 Modellannahmen

Im folgenden werden die Annahmen, auf welchen das Mehrphasenprogramm ECLIPSE 100 für die Untersuchung von Umwelteinflüssen beruht, zusammengefasst.

- Die zwei betrachteten Phasen sind nicht mischbar
- Die beiden Phasen werden durch Wasser und Luft, durch Wasser und ein anderes Gas oder durch Wasser und eine nicht mischende Flüssigkeit (z.B. ein organisches Lösungsmittel) gebildet.
- Es liegt eine Festphase vor, welche entweder eine einfache Porosität oder eine duale Porosität (primäre und sekundäre Porosität, Klüfte und Matrix) aufweist
- Mindestens eine der beiden Phasen ist in jedem Gebiet des Modells vorhanden
- Die Dichten und Viskositäten der Phasen sind eine reine Funktion des Druckes
- Der Fluss beider Phasen gehorcht dem Gesetz von Darcy
- Die Hauptachsen des Permeabilitätstensors der Festphase sind

parallel zum kartesischen Koordinatensystem

- Hysteresiseffekte der relativen Durchlässigkeiten und des Kapillardruckes können berücksichtigt werden (Diese Option wird in der folgenden Anwendung nicht benutzt.)
- Wasser ist nur schwach komprimierbar und die Kompressibilität ist konstant
- Die Kompressibilität der Gasphase kann druckabhängig sein. Nur eine Phase kann als Gas behandelt werden
- Die Festphase (Gestein) ist nur schwach komprimierbar
- Die Eigenschaften der Festphase (Permeabilität, Porositäten, Kapillardruck) können räumlich beliebig heterogen sein

### 3 BESCHREIBUNG DES MODELLS

Das Modell ist ein vertikaler Süd-Nord Schnitt durch das geplante Endlager, welcher das Grubengebäude (Endlager) und die Schichten Oxford und Kimmeridge umfasst. Diese drei Einheiten werden als homogene, poröse Medien mit konstanten Eigenschaften und einer stark vereinfachten Geometrie modelliert. Der geometrische Modell-aufbau ist in Abbildung 3-1 dargestellt.

Das Resthohlraumvolumen des Grubengebäudes, welches im Modell möglichst genau berücksichtigt werden muss, beträgt  $1,45 \cdot 10^6 \text{ m}^3$ . Die repräsentative Tiefe des Modells, d.h. die Ausdehnung senkrecht zur Modellebene, und die Abmessungen des Grubengebäudes in der Modellebene werden so gewählt, dass das resultierende Porenvolumen des Grubengebäudes bei einer Porosität von 10 % dem Resthohlraumvolumen entspricht und die Abmessungen des Grubengebäudes im Modell wenigstens in der Größenordnung die tatsächlichen Abmessungen wiedergibt. Das Grubengebäude wird als Rechteck mit einer Länge (Süd-Nord Ausdehnung) von 1500 m und einer Höhe von 9,7 m modelliert. Die repräsentative Tiefe des Modells, d.h. die Ausdehnung senkrecht zur Modellebene ist 1000 m.

Das Oxford wird als 150 m, der Kimmeridge als 300 m mächtige Schicht simuliert. Die Basis des Grubengebäudes liegt 1090 m unter dem Grundwasserspiegel, 1000 m unter N.N. und 50 m über der Basis des Oxford.

Das Oxford besteht aus Tonmergelsteinen, Kalksteinen und oolithischen Erzen mit einem geschätzten Tongehalt von etwa 20 %. Das Gestein ist geklüftet, die Klüfte sind teilweise mit Kalzit verfüllt und weisen Klüftweiten von etwa 1 mm bis (selten) 10 cm auf. Im Referenzfall wird das Oxford als Festphase mit einer einfachen Porosität, in einem Rechenfall im Rahmen der Sensitivitätsanalyse als Medium mit dualer Porosität modelliert.

Der Kimmeridge besteht aus Mergeln, Tonsteinen, Mergelkalken und Kalksteinen. Der Tongehalt ist wesentlich höher als im Oxford und die Klüftung bedeutend weniger ausgeprägt. Der Kimmeridge wird als Festphase mit einer einfachen Porosität dargestellt.

Als obere und untere Modellgrenzen werden die Schichtgrenzen zu den sehr undurchlässigen Schichten im Hangenden (Basis Unterkreide) und im Liegenden (Obergrenze Dogger) gewählt. Dies erlaubt, diese Grenzen als undurchlässig anzunehmen.

Die vertikalen Modellgrenzen liegen jeweils 1000 m südlich und nördlich der Grube. Dieser Wert entspricht ungefähr dem Abstand der südlichen Verbreitungsgrenze des Oxford vom Grubengebäude. Der Abstand der Modellgrenzen vom Grubengebäude ist Gegenstand der Sensitivitätsanalyse.

Die regionale, 3-dimensionale Modellierung der Grundwasserströmung im Bereich des Grubengebäudes ergibt einen ungefähr Süd-Nord

gerichteten, subhorizontalen Wasserfluss mit einem grossräumigen hydraulischen Gradienten von 0,001 m/m [2,3,4]. Die Geometrie des Grubengebäudes und des Grundwasserflusses in dessen Umgebung bilden ein dreidimensionales System. Die Zielsetzung der vorliegenden Arbeit ist die Beurteilung der Auswirkungen der Gasproduktion im Endlager. Eine zweidimensionale Modellierung ergibt konservative Ergebnisse, indem der Abfluss von Gas aus dem Lager nach Osten und Westen und das mögliche seitliche Umströmen der Grubenumgebung vernachlässigt und damit der resultierende Druckaufbau und die Änderung des Grundwasserfliesssystems überschätzt wird.

Modellrechnungen werden für einen Referenzfall durchgeführt, welcher sich auf die in [2,3 und 4] für die entsprechenden Referenzfälle verwendeten hydrogeologischen Parameter sowie auf möglichst realistische Schätzungen für die übrigen relevanten Parameter abstützt. Der Einfluss der wichtigen und unsicheren Parameter wird mit einer Sensitivitätsanalyse untersucht.

### 3.1 Eigenschaften von Gestein, Wasser und Gas

Im Endlager entstehen verschiedene Gase durch Korrosion, Radiolyse und Biodegradation von organischem Material. Die weitaus grösste Gasmenge ist Wasserstoff, welcher vor allem durch Korrosion von Stahl und Eisen erzeugt wird. Für die Modellierung wird angenommen, dass die gesamte produzierte Gasmenge aus Wasserstoff besteht.

Das Verhalten der flüssigen und gasförmigen Phase wird somit durch die Eigenschaften von Wasser und Wasserstoff bestimmt.

Für die Eigenschaften der festen Phase sind die Parameter des Grubengebäudes, des Oxford und des Kimmeridge massgebend. Das Grubengebäude umfasst die Kammern, Strecken und Feste sowie den Abfall und die Verfüllung der verschiedenen aufgefahrenen Hohlräume. Für die Modellierung wird angenommen, dass das Grubengebäude als homogenes, poröses Medium betrachtet werden kann. Da das Grubengebäude ein dichtes Netz von relativ gut durchlässigen, verfüllten Strecken und Kammern enthält, wird der Druckaufbau im Innern hauptsächlich durch die Eigenschaften des umgebenden Gesteins und weniger durch die Feinstruktur im Innern bestimmt, so dass diese Näherung gerechtfertigt ist.

Die Werte für die Permeabilitäten und Porositäten der drei Festphasen sind in Tabelle 3-1 zusammengestellt.

Als Kompressibilität wird für alle drei Festphasen ein Wert von

$$c_R = 5,8 \cdot 10^{-5} \text{ bar}^{-1}$$

angenommen.

Zu den relativen Durchlässigkeiten und Kapillardrücken als Funktion der Sättigung liegen für die drei Festphasen keine standortspezifischen Messungen vor. Ebenso wenig sind gesteinspezifische Daten in der Literatur aufgeführt. Aus diesem Grunde wird auf Literaturdaten für ähnliche Gesteinstypen zurückgegriffen [5,6]. Einige der dort aufgeführten Daten für den Kapillardruck sind in Abbildung 3-2 dargestellt, um als Basis für den folgenden Parameteransatz zu dienen. Die Abhängigkeit der relativen Durchlässigkeiten und der Kapillardrücke von der Sättigung werden nach Brooks und Corey parametrisiert:

Kapillardruck:

$$P_c = P_b / S_e^{1/\lambda} \quad (23)$$

Relative Durchlässigkeit der flüssigen Phase (Wasser):

$$k_{rw} = S_e^{(2+3\lambda)/\lambda} \quad (24)$$

Relative Durchlässigkeit der Gasphase:

$$k_{rg} = (1 - S_e)^2 \cdot (1 - S_e^2) \quad (25)$$

wobei  $\lambda$  und  $P_b$  gesteinspezifische Konstanten und  $S_e$  die effektive Wassersättigung sind. Letztere ist wie folgt definiert

$$S_e = \frac{s_w - s_{wr}}{1 - s_{gr} - s_{wr}} \quad (26)$$

mit

- $s_w$  Wassersättigung (siehe Gleichungen (1) und (2))
- $s_{wr}$  irreduzible Wassersättigung (entspricht ungefähr dem Haftwasseranteil)
- $s_{gr}$  kritische Gassättigung

In der folgenden Modellierung wird angenommen, dass das System zunächst wassergesättigt ist. Das sich bildende Gas verdrängt das Wasser. Die irreduzible Wassersättigung ist die minimale Sättigung, bis zu welcher das Gas Wasser verdrängen kann. Unterhalb dieser Sättigung ist Wasser unbeweglich. Die kritische Gassättigung ist die minimale Gassättigung, bei welcher Gas strömen kann. Bei kleinerer Gassättigung ist Gas unbeweglich.

Aufgrund der in Abbildung 3-2 dargestellten Kurven werden für die drei Festphasen die Werte der Parameter  $s_{wr}$ ,  $s_{gr}$ ,  $\lambda$  und  $P_b$  festgelegt. Sie sind in Tabelle 3-2 zusammengestellt. Die resultierenden Kurven für die relativen Durchlässigkeiten und die Kapillardrücke zeigen die Abbildungen 3-3 bis 3-6.

Von den Eigenschaften von Wasser und Gas sind die Dichte-Druck Beziehungen und die Löslichkeit von Wasserstoff in Wasser als

Funktion des Druckes wesentlich. Als Umgebungstemperatur wird 50 °C angenommen.

Als Dichte von Wasser bei Referenzbedingungen wird jene von Süßwasser bei 50 °C und atmosphärischem Druck verwendet

$$\rho_w^0 = 989 \text{ kg/m}^3$$

Die Dichte von Wasser bei anderen Drücken wird mit der Kompressibilität von

$$c_w = 4,64 \cdot 10^{-5} \text{ bar}^{-1}$$

berechnet. Durch die Lösung von Wasserstoff erhöht sich das Volumen des Wassers ebenfalls. Da keine Daten für die Lösung von Wasserstoff in Wasser verfügbar sind, werden Daten der Ölindustrie für die Lösung von Gas in Öl [7] auf das System Wasserstoff/Wasser extrapoliert.

Wasserstoff wird als ideales Gas behandelt. Bei 50 °C und 1 atm Druck beträgt seine Dichte

$$\rho_g^0 = 0,074513 \text{ kg/m}^3$$

Folgende Viskositätswerte von Wasser und Gas werden verwendet:

$$\mu_w = 0,6 \text{ cp}$$

$$\mu_g = 0,0096 \text{ cp}$$

Es wird angenommen, dass die Löslichkeit von Wasserstoff in Wasser dem Gesetz von Henry folgt

$$R_{sm} = p_a/H \tag{27}$$

wobei  $R_{sm}$  die Löslichkeit von Wasserstoff in Wasser,  $p_a$  der Partialdruck des Wasserstoffs und  $H$  die Konstante von Henry sind. Letztere wurde für die Temperatur von 50 °C aus Daten für tiefere Temperaturen [8] extrapoliert. Die berechnete Wasserstofflöslichkeit, ausgedrückt in der Einheit  $\text{Nm}^3/\text{Nm}^3$  ist in Figur 3-7 dargestellt.

### 3.2 Diskretisierung

Das zweidimensionale Modell wird durch 760 Finite-Differenzen-Elemente aufgebaut. Das Netz besteht aus 40 Elementkolonnen in der horizontalen Richtung (x-Richtung) und 19 Elementschichten in der vertikalen Richtung (z-Richtung). Die Länge der Elemente in der horizontalen Richtung liegt zwischen 2 m und 350 m, die Mächtigkeit zwischen 0,1 m und 100 m. Die Diskretisierung ist in Abbildung 3-8 dargestellt. Die Elementgrößen unterscheiden sich um mehr als 2 Größenordnungen, der Unterschied zwischen benach-

barten Elementen ist unter einem Faktor 3 gehalten.

Die Diskretisierung an der Grenze zwischen dem Grubengebäude und dem Oxford muss fein sein, damit der Druckaufbau und die Gasbewegung mit genügender Genauigkeit simuliert werden kann. Mit dem Programm werden Mittelwerte für Sättigung und Druck für jedes Element berechnet. Mit diesen Mittelwerten werden der Fluss von Wasser und Gas über die Elementgrenzen ermittelt. Sobald die Gaskonzentration den kritischen Wert  $s_{gr}$  übersteigt und das Gas beweglich wird, steigt es zur Obergrenze des Grubengebäudes. Falls die obersten Elemente im Grubengebäude, welche an die Elemente des Oxford grenzen, zu gross sind, kann die mittlere Sättigung dieser Elemente die Verhältnisse in der Nähe der Grubengrenze nicht wiedergeben. Aufgrund früherer Erfahrungen wird als Dicke der obersten Elementschicht 0,1 m gewählt.

Eine extrem dünne oberste Elementschicht führt ebenfalls nicht auf realistische Ergebnisse. Ihre Dicke entspricht der minimalen Mächtigkeit einer Gasblase, welche sich zusammenhängend über die ganze Fläche der Grube ausdehnen kann. Die Grenze zwischen Grubengebäude und Oxford ist weder glatt (im Sinne einer geringen Rauigkeit) noch verläuft sie in Wirklichkeit horizontal. Die Rauigkeit dürfte in der Grössenordnung von einigen Centimetern oder mehr betragen. So lange die Dicke der Gasblase geringer ist als die Rauigkeit, liegt das Gas nur in einzelnen, diskontinuierlichen Blasen vor. Nur bei einer grösseren Dicke könnte das Gas (bei horizontaler Grenzfläche) als zusammenhängende Blase existieren.

Ein weiterer Grund gegen die Wahl von zu kleinen Elementen ist die Heterogenität der tatsächlichen Verhältnisse im Grubengebäude und im umgebenden Gestein. Sowohl das Grubengebäude als auch Oxford und Kimmeridge werden als homogene Medien modelliert. Insbesondere das Grubengebäude ist aber in Wirklichkeit äusserst inhomogen aufgebaut, besteht es doch aus Abfallgebänden, Verfüllungen verschiedener Art (Einlagerungskammern, Abbaufelder und Strecken) und mehr oder weniger aufgelockerter Feste. Ein Element mit homogenen Eigenschaften kann also nur ein gewisses Mindestvolumen repräsentieren.

### 3.3 Anfangs- und Randbedingungen, Quellterm

Der obere und der untere Rand des Modells werden als undurchlässig angenommen. Entsprechend dem grossräumigen, Süd-Nord gerichteten hydraulischen Gradienten von 0,001 m/m werden an den vertikalen Rändern hydrostatische Drücke vorgegeben, wobei am südlichen Modellrand zusätzlich die Bedingung gilt, dass weder Wasser noch Gas aus dem Modell abfliessen können: In Bereichen, wo mit den vorgegebenen Drücken der hydraulische Gradient auf dem Rand einen Fluss nach Süden, aus dem Modell hinaus erzeugen würde, wirkt auch der südliche Rand als undurchlässige Modellgrenze. Damit wird der Umstand berücksichtigt, dass das Oxford und der

Kimmeridge ungefähr 1 km südlich des Endlagers auskeilen, die Unterkreide direkt auf dem Dogger liegt und die beiden undurchlässigen Schichten das hydraulische System nach Süden begrenzen. Die Modellrechnungen werden zeigen, dass die Druckerhöhung im Endlagerbereich als Folge der Gasproduktion gross genug ist, um bei vorgegebenem Druck am Modellsüdrand die Fliessrichtung südlich des Endlagers gegen die regionale Süd-Nord Richtung zu drehen, so dass die oben aufgeführte Zusatzbedingung wirksam wird und der südliche Modellrand undurchlässig ist. Das erzeugte Gas und das durch Gas verdrängte Wasser können deshalb ausschliesslich nach Norden abfliessen.

Die Horizontalausdehnung des Modells wird im Rahmen der Sensitivitätsanalyse variiert, um den Einfluss der vertikalen Ränder und insbesondere des etwas willkürlich gewählten Randes im Norden, also im Abstrombereich, auf die Bedingungen in und unmittelbar um das Grubengebäude zu untersuchen.

Die Wahl der Anfangsbedingungen ist komplizierter. Die Schachttanlage Konrad wird jetzt seit etwa 30 Jahren unter atmosphärischen Bedingungen gehalten und diese Bedingungen werden während der Betriebsphase des Endlagers, also während weiteren rund 40 Jahren, den Grundwasserfluss in der Grubenumgebung beeinflussen. Während dieser Zeit fliesst kontinuierlich Wasser aus dem umgebenden Gestein in die Grube. Der Porenwasserdruck in der Grubenumgebung sinkt, wobei sich der Absenktrichter um die Grube beständig ausdehnt. Der Zufluss zur Grube ist äusserst gering und wird zu einem guten Teil durch die Bewetterung abgeführt. Durch die damit verbundenen Verdunstungsvorgänge können im Oxford im Nahbereich der Grube ungesättigte Zonen entstehen. Nach dem Verschluss des Endlagers wird die Sättigung in diesen Zonen und im Endlager nur langsam durch zuströmendes Wasser wieder ansteigen. Für die Modellierung werden vereinfachte Anfangsbedingungen und insbesondere vollständige Sättigung des gesamten Modellgebietes angenommen. Der Einfluss der Anfangsbedingungen wird im Rahmen der Sensitivitätsanalyse untersucht.

Als Anfangsbedingung in den Schichten Oxford und Kimmeridge wird für den Referenzfall die stationäre Druckverteilung gewählt, die unter Annahme eines gesättigten Systems den oben beschriebenen Randbedingungen an den seitlichen, oberen und unteren Modellrändern entspricht, falls der Druck im Grubengebäude nicht auf Atmosphärendruck gesetzt sondern im freien Gleichgewicht belassen wird. Erst nach der Berechnung dieser Druckverteilung wird der Anfangsdruck in der obersten Elementschicht des Grubengebäudes auf 1 bar gesetzt und in den darunterliegenden Schichten entsprechend dem hydrostatischen Gradient festgelegt.

Als Rate der Gasproduktion wird ein Wert von  $42\ 000\ \text{Nm}^3/\text{a}$ , entsprechend  $42\ \text{Nm}^3/\text{a}$  pro Meter Modelltiefe (Dimension senkrecht zur Modellebene) angenommen. Die Gasproduktion erfolge gleichmässig im ganzen Grubengebäude, sie beträgt damit

$$q_G = -2,887 \cdot 10^{-3} \text{ Nm}^3 / (\text{a} \cdot \text{m}^3)$$

bezogen auf den Kubikmeter Grubenvolumen (bulk volume). Die Gasproduktion sei zeitlich konstant und daure 5000 Jahre.

### 3.4 Sensitivitätsanalyse

Die Sensitivitätsanalyse ist ein wesentlicher Teil der Modellrechnungen, da verschiedene Modellparameter nicht durch standortspezifische Messungen bestimmt sondern aufgrund von verfügbaren Daten für ähnliche Gesteine festgelegt werden. Es wird keine Sensitivitätsanalyse im engen Sinn durchgeführt, d.h. es werden keine mathematischen Ableitungen der Modellresultate nach den Modellparametern ermittelt. Vielmehr werden Modellrechnungen für veränderte Werte der potentiell wichtigen und der unsicheren Parameter durchgeführt, um die Unsicherheit der Resultate bezüglich ungünstigen Veränderungen (z.B. grösserer Druckanstieg) aufzuzeigen. Pro Rechenfall wird jeweils ein Parameter gegenüber dem Referenzwert verändert.

#### 3.4.1 Modelllänge

Im Referenzfall beträgt die Modelllänge 3500 m. In einem Rechenfall wird das Modell im Zu- und im Abstrombereich um jeweils 1000 m, insgesamt also um 2000 m ausgedehnt, wobei die Randbedingungen entsprechend dem grossräumigen hydraulischen Gradienten von 0,001 m/m angepasst werden.

#### 3.4.2 Anfangsbedingungen

Die vermuteten tatsächlichen und die für den Referenzfall gewählten Anfangsbedingungen wurden in Abschnitt 3.3 beschrieben und diskutiert. Die letzteren entsprechen im Oxford und Kimmeridge der stationären Druckverteilung bei den festgelegten Randbedingungen und unter gesättigten Verhältnissen, falls im Grubengebäude nicht atmosphärischer Druck vorgegeben wird. Der Druck im Grubengebäude wird erst nachträglich in der obersten Elementschicht auf 1 bar gesetzt und in den darunterliegenden Schichten entsprechend dem hydrostatischen Gradienten festgelegt. Diese Randbedingungen sind innerhalb des Grubengebäudes und in der Nähe der vertikalen Modellränder ziemlich realistisch, beschreiben aber die Verhältnisse im Oxford in der Grubenumgebung schlecht. Zu Beginn der Modellrechnung weist die Druckverteilung an der Grenze des Grubengebäudes einen unphysikalischen Sprung auf, welcher erst während einer anfänglichen Zeitperiode abgebaut wird. Mit dem Abbau verbunden ist ein hoher hydraulischer Gradient und ein starker Wasserfluss ins Grubengebäude, so dass der Druckanstieg mindestens anfänglich überschätzt wird.

Eine andere Druckverteilung als Anfangsbedingung im Sinne der

Sensitivitätsanalyse wird wie folgt festgelegt. Wiederum wird die stationäre Druckverteilung im Oxford und Kimmeridge unter Annahme von gesättigten Verhältnissen und für die spezifizierten Randbedingungen berechnet, wobei diesmal als weitere Randbedingung Atmosphärendruck an der Grenze zum Grubengebäude festgelegt wird. Damit wirkt das Grubengebäude als regionale Senke, wobei der Wasserzufluss zum Modell über die seitlichen, vertikalen Modellränder erfolgt. (Eine transiente Modellrechnung ergibt mit einer anfänglich hydrostatischen Druckverteilung nach 70 Jahren ein sehr ähnliches Druckfeld.) Die Druckverteilung ist in Süd-Nord Richtung fast spiegelsymmetrisch um die Grubenachse, da die Gradienten des Absenktrichters wesentlich grösser sind als jener des regionalen Wasserflusses. Der berechnete Druck weist in den obersten Elementen des Kimmeridge oberhalb des Grubengebäudes Werte zwischen -31 bar und -18 bar auf. Erst gegen die seitlichen Modellränder hin steigt der Druck auf die durch die Randbedingungen festgelegten Werte von rund +70 bar an. Dieses unphysikalische Ergebnis hängt mit der Annahme der vollständigen Sättigung und der Wahl der Randbedingung am oberen Modellrand zusammen. Da in der Modellmitte der Wasserzufluss ins Grubengebäude durch die Bedingungen am oberen, undurchlässigen Modellrand beschränkt ist, ist der vertikale Gradient des hydraulischen Potentials klein, d.h. der Druckgradient von der Grössenordnung des hydrostatischen Gradienten. Da zudem der Druck an der Grenze zum Grubengebäude auf 1 bar gesetzt ist, sinkt er im Bereich oberhalb des Grubengebäudes auf negative Werte.

In Wirklichkeit ist die Grenze zur Unterkreide nicht undurchlässig. Zudem bilden sich oberhalb des Grubengebäudes wahrscheinlich teilgesättigte Bereiche, wodurch die hydraulische Durchlässigkeit abnimmt und bei gleichem Wasserfluss der Druckgradient ansteigt.

Die als alternative Anfangsbedingung berechnete Druckverteilung wird deshalb wie folgt abgeändert: Alle negativen Drucke werden Null gesetzt.

Die tatsächlichen Druckverhältnisse nach Verschluss des Endlagers dürften zwischen den beiden gewählten Anfangsbedingungen liegen. Nicht entsprechend den in Realität zu erwartenden Verhältnissen sind die Annahme der vollständigen Sättigung, die Annahme der raschen (instantanen) Flutung des Grubengebäudes und die Vernachlässigung der beim Endlagerverschluss mit eingeschlossener Luft. Diese Vereinfachungen sind zulässig und mindestens teilweise konservativ. Wegen der vollständigen Sättigung des Modellgebietes zu Beginn der Simulationsperiode muss das entstehende Gas Porenwasser verdrängen und kann nicht durch Kompression von Luft in teilgesättigte Bereiche eindringen. Dadurch wird die Beeinflussung der Grundwasserströmung eher überschätzt. Die Resultate werden zeigen, dass nach dem Einsetzen der Gasfreisetzung aus dem Endlager in das Nebengestein der Druckanstieg zunächst leicht abnimmt und anschliessend konstant bleibt. Durch die Vernachlässigung der eingeschlossener Luft wird der Druckanstieg nicht unterschätzt (siehe auch die Bemerkung zur Annahme der vollstän-

digen Sättigung in Abschnitt 1.2).

### 3.4.3 Duale Porosität

Die gesamte verfügbare Porosität im Oxford beträgt ungefähr 10 %. Für die hydrogeologische Modellierung wurde eine Fliessporosität von 2 % verwendet [2,3,4]. Im Referenzfall wird für die Modellierung der Gasausbreitung angenommen, dass der Fluss des Porenwassers und des Gases durch die gesamte verfügbare Porosität erfolgt. Im Rahmen der Sensitivitätsanalyse wird ein Rechenfall definiert, welcher die Möglichkeit des Programms ECLIPSE zur Modellierung einer Festphase mit dualer Porosität ausnutzt. In diesem Rechenfall wird die primäre Porosität des Oxford 2 %, die sekundäre Porosität 8 % gesetzt. Die Bedeutung der primären und der sekundären Porosität sowie deren Behandlung im Programm ECLIPSE wurde in der Einleitung zum Kapitel 2 behandelt.

### 3.4.4 Permeabilität des Oxford

Im Referenzfall beträgt die Permeabilität des Oxford  $10^{-15} \text{ m}^2$ . Dieser Wert bestimmt wesentlich den Druckaufbau im Endlager während der Gaserzeugung. Zunächst löst sich das entstehende Gas im Porenwasser innerhalb des Endlagers. Sobald die Löslichkeitsgrenze erreicht ist, bildet sich freies, d.h. ungelöstes Gas. Da das Endlager als anfänglich wassergesättigt angenommen wird, muss das entsprechende Volumen Porenwasser aus dem Endlager in das Oxford abgepresst werden, was den Aufbau eines hydraulischen Gradienten zwischen dem Endlager und dem Oxford erfordert. Auch für den Abtransport des ungelösten Gases aus dem Endlager muss sich zunächst ein Druckgradient aufbauen. Da die abfliessenden Volumina Wasser und Gas vorgegeben sind und die Flüsse hauptsächlich durch das Oxford limitiert werden, stellen sich die Gradienten entsprechend der Durchlässigkeit des Oxford ein. Im Rahmen der Sensitivitätsanalyse werden zwei Rechenfälle mit jeweils um 1 Größenordnung reduzierter Oxford-Permeabilität, d.h. mit  $10^{-16} \text{ m}^2$  und  $10^{-17} \text{ m}^2$  durchgeführt.

### 3.4.5 Kapillardruck

Im Anfangszustand, wenn sowohl Grubengebäude als auch Oxford wassergesättigt sind, beträgt der Kapillardruck im Grubengebäude 0,015 bar und im Oxford 0,05 bar (Abschnitt 3.1, Gl. (23) und Tabelle 3-2). Falls der Wasserdruck in beiden Einheiten gleich ist, übersteigt nach Gl. (7) der Gasdruck im Oxford jenen im Grubengebäude um 0,035 bar. Durch die Gaserzeugung steigt der Wasser- und damit auch der Gasdruck im Endlager an. Damit Gas aus dem Endlager ins Oxford freigesetzt werden kann, muss der Gasdruck - also die Summe von Wasserdruck und Kapillardruck - im Endlager höher sein als im Oxford. Je grösser der Kapillardruckunterschied zwischen Oxford und Grubengebäude ist, umso höher

muss der Druck im Endlager ansteigen, bis die Gasfreisetzung einsetzt. Da die Kapillardruckkurven nicht aufgrund von standort-spezifischen Daten festgelegt werden können, wird ein zusätzlicher Rechenfall mit um den Faktor 3 erhöhten Kapillardrücken im Oxford und Kimmeridge durchgeführt.

#### **3.4.6 Gasproduktionsrate**

Die Gasproduktionsrate bestimmt sowohl die Rate, mit welcher Wasser aus dem Endlager abgepresst, als auch die Rate, mit welcher das ungelöste Gas freigesetzt werden muss. Sie bestimmt damit direkt den Druckaufbau im Grubengebäude. Um diesen Einfluss zu untersuchen, wird in einem Rechenfall die Gasproduktionsrate um den Faktor 3 erhöht.

#### 4 ERGEBNISSE

Die Darstellung der Modellergebnisse soll einerseits Antwort auf die Fragen nach den möglichen quantitativen Auswirkungen der Gasproduktion im Endlager auf dessen Langzeitsicherheit, insbesondere also auf die Fragen

- nach dem Druckanstieg im Endlagerbereich
- nach der Veränderung der Grundwasserströmung in der Umgebung des Endlagers

geben und andererseits das Verständnis für die ablaufenden Prozesse und den Einfluss der verschiedenen Parameter vermitteln. Die quantitativen Ergebnisse stellen keine exakten Prognosen dar, sie zeigen vielmehr die Größenordnung der Auswirkungen. Durch die 2-dimensionale Modellierung wird sowohl der Druckanstieg als auch die Veränderung der Grundwasserströmung überschätzt.

In einem ersten Abschnitt werden die Ergebnisse für den Referenzfall ausführlich dargestellt und diskutiert.

Mit der Sensitivitätsanalyse werden einzelne Parameter variiert und die Resultate mit denen des Referenzfalls verglichen, um den Parametereinfluss zu bestimmen. Die Parametervariationen betreffen die Modellausdehnung, die Anfangsbedingungen, die sekundäre Porosität, die Permeabilität des Oxford, den Kapillardruck und die Gasproduktionsrate.

##### 4.1 Referenzfall

Der Referenzfall ist durch die in Abschnitt 3.1 definierten Gesteins- und Materialeigenschaften und die in Abschnitt 3.3 beschriebenen Rand- und Anfangsbedingungen charakterisiert. Die Drücke an den vertikalen Modellrändern sind vertikal im hydrostatischen Gleichgewicht und spiegeln den grossräumigen horizontalen Gradienten von 0,001 m/m wieder. Die Anfangsbedingungen im Oxford und Kimmeridge entsprechen dem stationären Zustand ohne Gasproduktion und ohne atmosphärische Randbedingung im Grubengebäude. Als Folge der hohen Durchlässigkeit des Grubengebäudes strömt in diesem Zustand im südlichen Grubenabschnitt Wasser aus dem Liegenden und aus dem Hangenden ins Grubengebäude und tritt im nördlichen Abschnitt wieder nach oben und nach unten ins Oxford aus. Eine schematische Darstellung des Fliessfeldes im Anfangszustand, welches auch dem stationären Zustand ohne Gasproduktion entspricht, zeigt Abbildung 4-1.

Erst nach der Berechnung der Anfangsbedingung im Oxford und Kimmeridge wird der Druck im Grubengebäude auf 1 bar gesetzt, um die atmosphärischen Bedingungen in der Schachanlage während der Betriebszeit der Grube und des Endlagers zu berücksichtigen.

In Abbildung 4-2 sind drei Vertikalprofile des Wasserdruckes im Anfangszustand dargestellt, eines im Zustrombereich in einem Abstand von 30 m von der Grube, eines durch die Grubenmitte und eines 30 m im Abstrombereich der Grube. Der Gasdruck unterscheidet sich nach Gl. (7) vom Wasserdruck nur durch den Kapillardruck und ist bei vollständiger Wassersättigung eine reine Rechengrösse. Da im Anfangszustand das ganze System gesättigt ist, betragen die Kapillardrücke 0,015 bar im Grubengebäude, 0,05 bar im Oxford und 0,075 bar im Kimmeridge. Ein Profil des Gasdruckes unterscheidet sich im Anfangszustand also nur wenig vom entsprechenden Wasserdruckprofil.

Im Anfangszustand enthält das System kein Gas. In einem ersten Zeitabschnitt löst sich das gesamte Gas im Porenwasser des Grubengebäudes auf. Diese erste Phase dauert so lange, bis die Löslichkeitsgrenze erreicht ist. Bei dem im Grubengebäude nach kurzer Zeit herrschenden Druck liegt diese bei (s. Abb. 3-7)

$$R_{sm} = 1,76 \text{ Nm}^3/\text{Nm}^3$$

Die Gasproduktionsrate beträgt pro Meter Modelltiefe  $42 \text{ m}^3/\text{a}$ , entsprechend einer Produktionsrate pro Kubikmeter Porenvolumen von

$$-q_g/\phi = 0,02887 \text{ Nm}^3/(\text{Nm}^3 \cdot \text{a})$$

Bei Vernachlässigung der geringen Gasmenge, welche in gelöster Form durch das abströmende Wasser abtransportiert wird, ergibt dies eine Zeitperiode von rund 60 Jahren bis zur Sättigung des Porenwassers im Grubengebäude mit Gas. Bis zu diesem Zeitpunkt bleibt das System vollständig wassergesättigt, es existiert nirgendwo eine Gasphase.

Der zweite Zeitabschnitt zeichnet sich dadurch aus, dass das Porenwasser gasgesättigt ist und das weiter entstehende Gas eine Gasphase aufbaut, welche aber noch nicht mobil ist. Mobilität tritt erst bei der kritischen Gassättigung von 0,02 (vgl. Tabelle 3-2) ein. Im stationären Zustand (ohne Gasproduktion) fliesst durch eine Endlagertiefe (Dimension senkrecht zu Modellebene) von 1 m eine Wassermenge von etwa  $0,15 \text{ m}^3/\text{a}$ . Dieser Wert ist rund um den Faktor 4 kleiner als das Ergebnis der 3-dimensionalen hydrogeologischen Modellierung, so dass der advective Abtransport von gelöstem Gas unterschätzt wird. Durch die entstehende Gasphase wird Porenwasser mit gelöstem Gas aus dem Endlager abgepresst. Da durch diesen Transportprozesse pro Jahr weniger als  $1 \text{ Nm}^3$  Gas abtransportiert wird, dauert es rund 70 Jahre bis das entstehende Gas mobil wird. Am Ende dieser zweiten Zeitperiode ist das Porenwasser im Endlager überall wassergesättigt und die Gassättigung hat den kritischen Wert  $s_{gr}$  erreicht.

Solange das gesamte erzeugte Gas im Porenwasser gelöst wird, also während der ersten Zeitperiode, erhöht sich der Wasserdruck nur leicht durch die Volumenzunahme des Wassers mit der ansteigenden

Menge gelösten Gases (vgl Abschnitt 3.1). Abbildung 4-3 zeigt den Gasdruckanstieg entlang 3 Vertikalprofilen (Mitte Endlager, Zu- und Abstrombereich in jeweils 30 m Abstand vom Endlager) am Ende der ersten Zeitperiode, nach 60 Jahren. Der Gasdruckanstieg ist definiert als Differenz zwischen dem aktuellen Gasdruck und dem Gasdruck (d.h. Wasserdruck + Kapillardruck bei vollständiger Wassersättigung) im stationären Zustand, wenn kein Gas produziert wird und das Grubengebäude nicht auf Atmosphärendruck gesetzt ist. Das Profil durch die Grubenmitte zeigt, dass der Unterdruck der Anfangsbedingung (Atmosphärendruck im Grubengebäude) fast vollständig ausgeglichen ist.

Während der zweiten Zeitperiode ist das Porenwasser mit gelöstem Gas gesättigt und alles neu erzeugte Gas geht in die Gasphase. Da die Gassättigung den kritischen Wert noch nicht erreicht hat, ist das Gas unbeweglich. Das Volumen, welches die Gasphase einnimmt, wird durch Abpressen von Porenwasser aus dem Endlager und, zu einem äusserst geringen Teil, durch Kompression des Wassers geschaffen. Dieses Abpressen des Wassers ist mit einem Druckanstieg im Endlager und dem Aufbau eines hydraulischen Gradienten innerhalb und in der Umgebung des Endlagers verbunden, welcher sich dem regionalen Gradienten überlagert. Da mit den gewählten Parametern die hydraulische Dispersivität im Oxford und Kimmeridge relativ hoch ist ( $10^{-2}$  m<sup>2</sup>/s bzw.  $10^{-3}$  m<sup>2</sup>/s), steigt der Druck auch im umgebenden Gestein rasch an. Der induzierte Gradient innerhalb des Endlagers ist äusserst gering. Unmittelbar ausserhalb des Endlagers liegt er in der Grössenordnung von 0,01 m/m, im übrigen Modellbereich ist er wesentlich kleiner.

Während der dritten Zeitperiode ist das Gas innerhalb des Endlagers mobil und steigt an dessen Obergrenze. Bei geringer Gassättigung beträgt der Kapillardruck im Endlager 0,015 bar, im Oxford 0,050 bar, so dass der Gasdruck im Endlager zunächst um 0,035 bar unter jenem im Oxford liegt. Damit Gas ins Oxford austreten kann, muss der Gasdruck im Endlager höher sein als ausserhalb. Dies wird erreicht, indem sich an der Obergrenze des Endlagers eine Zone mit geringer Wassersättigung (die Gasblase) bildet, in der nach Abbildung 3-3 der Kapillardruck ansteigt. Diesen Sachverhalt kann man sich vereinfacht auch wie folgt vorstellen: Da wegen des geringen Gewichtes des Gases der Gasdruck in einer Gasblase an der oberen und unteren Grenze praktisch gleich ist, entspricht er dem Wasserdruck an der unteren Grenze zuzüglich des dort herrschenden Kapillardruckes. Falls der vertikale Gradient des Wasserdruckes ungefähr hydrostatischen Bedingungen entspricht, genügt eine Gasblase der Dicke von ungefähr 0,35 m, um Gas freizusetzen. Nach den Modellrechnungen setzt die Freisetzung bei einer ungefähren Gasblasendicke von 0,4 m ein, wobei dieser Wert aufgrund der Diskretisierung nur ungefähr ermittelt werden kann. (Die beiden obersten Elementlagen des Finite-Differenzen-Netzes weisen eine Dicke von 0,1 m und 0,3 m auf.) Der Gasdruckanstieg nach 155 Jahren ist in Abbildung 4-4 dargestellt. Die Vertikalprofile zeigen die Anwesenheit der Gasblase und illustrieren, dass der Druckanstieg im Endlager am höchsten ist und dass die

induzierten Gradienten in vertikaler Richtung äusserst gering sind (Grössenordnung 0,01 bar auf 300 m). (Die Druckerhöhung in der Teufe des Grubengebäudes im Profil auf der Zustromseite ist numerisch bedingt und nicht physikalisch.) Die Freisetzung von Gas aus dem Endlager setzt nach 160 Jahren ein.

Der Gasdruck im Oxford und im Endlager in der oberen Endlagerecke auf der Abstromseite ist in Abhängigkeit der Zeit in Abbildung 4-5 dargestellt. Die Abbildung zeigt, wie der Druck im Endlager und im Oxford ansteigt, bis der Endlagerdruck jenen im Oxford nach 160 Jahren erreicht und die Freisetzung beginnt. (Tatsächlich übersteigt der Endlagerdruck den Oxforddruck geringfügig, was aber in der Abbildung nicht erkannt werden kann.)

Die Gasausbreitung nach 190 Jahren ist in Abbildung 4-6 in Form von Linien gleicher Gassättigung ( $s_g$ ) dargestellt. Die Freisetzung erfolgt zunächst nur am abstromseitigen Ende des Endlagers. Sobald sich an der oberen Grenze des Endlagers die Gasblase gebildet hat, wird das abgepresste, mit gelöstem Gas gesättigte Wasser bevorzugt über die seitlichen Endlagergrenzen freigesetzt, so dass sich dort, als Folge des Druckabfalls, zuerst eine Gasphase ausserhalb des Endlagers entwickelt. Der seitliche Abfluss des Wassers wird zusätzlich durch die Nähe der undurchlässigen Schichten im Hangenden und Liegenden unterstützt. Sobald der Gasdruck im Endlager stark genug angestiegen ist, um eine Gasfreisetzung zu ermöglichen, setzt diese dort ein, wo der Widerstand am geringsten (höchste Gassättigung) und wo der Gradient am grössten ist. Dies ist auf der Abstromseite der Fall.

Das freigesetzte Gas strömt senkrecht nach oben zur oberen Modellgrenze und baut dort eine Gasblase auf, welche sich laufend ausdehnt und Wasser verdrängt. Wegen des regionalen Wasserflusses nach Norden ist sie leicht asymmetrisch. Nach rund 1000 Jahren setzt auch auf der Anstromseite des Endlagers die Gasfreisetzung ein. Abbildung 4-7 zeigt die Gasausbreitung zu diesem Zeitpunkt. Bis zum Ende der Gasproduktion nach 5000 Jahren ändert sich das Bild nicht mehr qualitativ (vgl. Abbildung 4-8).

Durch die Ausdehnung der Gasblasen im Endlager und, nach einiger Zeit, auch an der Basis der Unterkreide (obere Modellgrenze) und durch die damit verbundene Verdrängung von Wasser ändert sich der Wasserfluss im Modell qualitativ.

Das Fliessfeld nach 165 Jahren, also kurz nach Beginn der Gasfreisetzung, ist in Abbildung 4-9 dargestellt. Der Wasserabfluss aus dem Endlager erfolgt vorwiegend auf dessen Nordseite. Das Fliessfeld am südlichen Ende ist durch den hohen Permeabilitätskontrast, die für Wasser extrem undurchlässige Gasblase ( $s_g = 0,62$ ,  $k_{rw} = 2,4 \cdot 10^{-3}$ ) und äusserst geringe Druckunterschiede bestimmt und zeigt ein kompliziertes Muster. (Die Feinstruktur des Fliessfeldes in der unmittelbaren Umgebung des Endlager-Südenendes dürfte aus numerischen Gründen und als Folge der endlichen Diskretisierung im Modell deshalb nur beschränkt belastbar sein.)

In der weiteren Umgebung entsteht ein Fliessfeld, welches gegenüber dem stationären Zustand ohne Gasproduktion stärker nach oben und im südlichen Modellbereich gegen Süden gerichtet ist. Die Vertikalkomponente der Filtergeschwindigkeit ist im allgemeinen sehr klein und liegt meistens unter  $10^{-4}$  m/a.

Das Fliessfeld nach 1000 Jahren ist in Abbildung 4-10 dargestellt und unterscheidet sich qualitativ von jenem nach 165 Jahren. Durch die Bildung der Gasblase an der Basis der Unterkreide wird Wasser nun aus diesem Modellgebiet verdrängt, weshalb praktisch im gesamten Modell die Flüsse abwärts gerichtet sind. Aufwärts steigende Wasserflüsse treten nur in eng begrenzten Bereichen oberhalb des nördlichen und des südlichen Endlagerendes auf. (Der oben aufgeführte Vorbehalt gegenüber den Modellergebnissen in der unmittelbaren Umgebung des Endlager-Südendes gilt auch hier.) Die nur teilweise wassergesättigten Bereiche oberhalb der Endlagerenden im Oxford und Kimmeridge stellen für den Wasserfluss einen Strömungswiderstand dar, da mit der sinkenden Wassersättigung die Durchlässigkeit abnimmt. Deshalb fließt das aus dem südlichen Bereich des aufsteigenden Gasstroms verdrängte Wasser zuerst nach unten ins Endlager und erst anschliessend nach Norden gegen den Modellrand.

Die Wasserflüsse in der Nähe des linken Modellrandes, der zu beiden Zeitpunkten als undurchlässige Grenze wirkt, sind auf den Ausgleich des Wassergehaltes des Gesteins bei ändernden Drücken zurückzuführen und deshalb äusserst gering. Durch die 2-dimensionale Modellierung wird der Einfluss der Gasproduktion auf den Wasserfluss überschätzt.

Der Druck im Endlager steigt so lange, als die Gasblase im Endlager aufgebaut wird. Er erreicht ungefähr am Ende der dritten Zeitperiode, also zu Beginn der Gasfreisetzung, den Maximalwert. Dieser beträgt im Referenzfall 0,26 bar. Während der vierten Zeitperiode halten sich die Gasproduktion und der Abfluss von Gas aus dem Endlager das Gleichgewicht und der Druckanstieg bleibt ungefähr konstant.

Sobald die Gasproduktion endet, beginnt der Druck im Endlager zu sinken. Nach 6000 Jahren beträgt die Differenz zum Maximalwert bereits 0,23 bar. Die Gasblase an der Obergrenze des Kimmeridge verändert sich gegenüber dem Zustand nach 5000 Jahren nicht wesentlich. Der Referenzfall wurde bis zum Jahr 15 000 simuliert. Am Ende dieser Periode hat sich die Gasblase leicht nach Norden verschoben und das Volumen der Gasphase ist etwas geringer. Der Abtransport von Gas aus dem Modellgebiet erfolgt hauptsächlich in gelöster Form mit dem Tiefengrundwasser.

Die Gasmenge, welche in gelöster Form aus dem Endlager freigesetzt wird, ist in Abbildung 4-11 dargestellt. Sie steigt zunächst mit der wachsenden Gassättigung und Abpressrate des Porenwassers im Endlager an. Zu Beginn der zweiten Zeitperiode erreicht sie einen ungefähr konstanten Wert, welcher allerdings nur

etwa 2 % der gesamten Gasproduktionsrate ausmacht. Sobald die Freisetzung in Gasform einsetzt, sinkt die abgepresste Wassermenge und damit die Freisetzung in gelöster Phase rasch ab, da die Gleichgewichtsdicke der Gasblase etwas geringer ist als die Dicke am Ende der dritten Zeitperiode. Erst wenn diese Gleichgewichtsdicke erreicht ist, steigt die Gasfreisetzung (gelöste Phase) wieder an und bleibt anschliessend ungefähr konstant.

Die Freisetzungsrates von Gas in Gasform als Funktion der Zeit ist in Abbildung 4-12 dargestellt. Wegen der oben erwähnten grösseren Gasblasendicke und dem damit verbundenen Gasdruck zu Beginn der Freisetzung im Vergleich mit dem Gleichgewichtswert steigt die Rate zunächst auf einen Maximalwert und sinkt erst anschliessend auf die konstante Rate von ungefähr  $42 \text{ m}^3/\text{a}$ .

#### 4.2 Variation der Modelllänge

Die Modelllänge, d.h. die Nord-Süd Ausdehnung des Modells beträgt im Referenzfall 3500 m, wobei die vertikalen Modellgrenzen auf der An- und Abstromseite jeweils einen Abstand von 1000 m vom Endlager aufweisen. Um den Einfluss der Modellberandung und der Randbedingungen zu untersuchen, wird in einem Rechenfall das Modellgebiet auf beiden Seiten um je 1000 m auf insgesamt 5500 m erweitert.

Die Modellergebnisse für den Zeitpunkt der Gasfreisetzung (knapp 160 Jahre) und für das Fliessfeld sind sehr ähnlich zu jenen im Referenzfall. Der absolute Wert für den Druckanstieg im Endlager beträgt aber 0,5 bar und ist damit rund doppelt so gross wie im Referenzfall.

Durch die Gasproduktion wird Wasser zunächst aus dem Endlager, später aus dem Gebiet am oberen Modellrand, wo sich die Gasblase bildet, verdrängt. Dieses Wasser muss über den nördlichen Modellrand abfliessen, was einen Süd-Nord gerichteten hydraulischen Gradienten von ungefähr 0,007 m/m erfordert. Da der Druck auf dem nördlichen Modellrand durch die Randbedingungen festgelegt ist, bedingt dies einen Minimalwert für den Druckanstieg im Endlagerbereich, welcher durch den Abstand zum Modellnordrand bestimmt ist. Der Vergleich der Modellresultate für den Rechenfall "Variation der Modelllänge" mit dem Referenzfall zeigt, dass bei den herrschenden Verhältnissen diese Bedingung bestimmend ist, indem nicht relativ kleinräumige Prozesse sondern der grossräumige Abfluss des verdrängten Wassers den Druckanstieg im Endlager Konrad steuern.

Der Druckanstieg im Endlager als Folge der Gasproduktion kann deshalb mit einem 1-Phasenmodell berechnet werden, in welchem sich im Endlagerbereich eine Volumenquelle befindet und mit welchem der Abfluss des ins Modell zuströmenden Volumens bis zu natürlichen Modellrändern simuliert wird. Das ins Modell zuströmende Volumen entspricht dabei dem durch die Gasproduktion ge-

schaffenen Volumen beziehungsweise dem verdrängten Wasser.

Zusätzlich zur Modellierung der Gasausbreitung im Gebirge mit dem Programm ECLIPSE 100 werden deshalb zur Berechnung des Druckanstiegs im Endlagerbereich das 3-dimensionale Grundwassermodell (Störzonenmodell) und das Programm FEM301 eingesetzt [2]. Da mit diesem Programm der stationäre Wasserfluss berechnet wird, werden Speichereffekte im Gestein vernachlässigt und der Druckanstieg überschätzt. Andererseits kann der Abfluss des Volumens in allen drei Dimensionen berücksichtigt werden.

Als Basis für die Berechnung des Druckanstiegs wird der in [2] ausführlich beschriebene Referenzfall R01 gewählt. Grubengebäude und Kimmeridge fallen gegen Westen ein, so dass die Gasfreisetzung aus dem Endlager und die Bildung der Gasblase am Ostrand des Grubengebäudes und im Bereich der östlichen Verbreitungsgrenze des Kimmeridge stattfinden werden. Der Porenwasserdruck an der Obergrenze von Kimmeridge und Grubengebäude beträgt dort rund 70 bar. Bei diesem Druck entspricht die Gasproduktionsrate von 42 000 Nm<sup>3</sup>/a einer Volumenquelle von 600 m<sup>3</sup>/a.

Die mit dem Programm FEM301 ermittelte Druckerhöhung als Folge der Gasproduktion erreicht im Endlagerbereich 0,15 bar. Gegen Norden baut sich die Druckerhöhung langsam ab und beträgt in 15 km Entfernung im Oxford noch 0,05 bar. Gegen Osten, Süden und Westen pflanzt sich der Druckanstieg hauptsächlich über den Cornbrash bis zu dessen Verbreitungsgrenze fort und sinkt erst jenseits dieser Grenze von rund 0,1 bar gegen Null.

Die 3-dimensionale Modellierung zeigt, dass für den grossräumigen Abfluss des verdrängten Wassers eine Druckerhöhung von 0,15 bar notwendig ist und dass mit dem 2-dimensionalen Zweiphasenmodell und den für den Referenzfall gewählten Rändern und Randbedingungen die Druckerhöhung konservativ überschätzt wird.

#### 4.3 Variation der Anfangsbedingungen

Wie in den Abschnitten 3.3 und 3.4.2 diskutiert, sind die hydraulischen Bedingungen nach Verschluss des Endlagers wesentlich durch die etwa 70 Jahre dauernde Periode der Offenhaltung und Bewetterung des Grubengebäudes bestimmt. Die Anfangsbedingung im Referenzfall entsprechen der stationären Druckverteilung im Oxford und Kimmeridge, welche durch die Randbedingungen des Modells und die Annahme vollständiger Sättigung bestimmt ist. Bei der Berechnung dieser Druckverteilung wird nicht angenommen, dass im Grubengebäude Atmosphärendruck herrscht. Der Druck im Grubengebäude wird erst anschliessend reduziert. Mit dieser Anfangsbedingung wird der Absenktrichter, der sich während der 70 Jahre gebildet hat, vernachlässigt.

Als Variation der Anfangsbedingungen wird, wie ebenfalls in Abschnitt 3.4.2 dargelegt ist, die stationäre Druckverteilung

verwendet, welche sich aus den Randbedingungen und der Berücksichtigung des Atmosphärendrucks im Grubengebäude bei vollständiger Sättigung des gesamten Modellgebietes ergibt. Diese Druckverteilung enthält den Absenktrichter, ergibt aber im Bereich oberhalb des Grubengebäudes negative Drücke. Die alternative Anfangsbedingung entspricht dieser Druckverteilung, wobei alle negativen Druckwerte Null gesetzt werden.

Mit dem Einsetzen der Gasproduktion baut sich ein Druckgradient auf, welcher den anfänglich ins Grubengebäude gerichteten Wasserfluss umdreht. Nach 60 Jahren ist die Druckverteilung überall gleich wie im Referenzfall. Dies bedeutet, dass die Anfangsbedingung nur während 60 Jahren von Einfluss ist. Während dieser ersten Zeitperiode liegt das Gas nur in gelöster Phase vor, so dass sich der Unterschied zum Referenzfall am stärksten in der freigesetzten Menge gelösten Gases ausdrückt. Der zeitliche Verlauf dieser Grösse ist in Abbildung 4-13 dargestellt. Der Vergleich mit der entsprechenden Abbildung für den Referenzfall zeigt, dass mit den geänderten Anfangsbedingungen während der ersten 60 Jahre wesentlich mehr Gas freigesetzt wird. Der Grund dafür ist der Umstand, dass in diesem Rechenfall der Druckunterschied zwischen dem Endlager und dem umgebenden Gestein zu Beginn der Modellperiode eher dem Gleichgewichtszustand entspricht als im Referenzfall, wo zunächst ein starker Wasserfluss aus dem Oxford ins Endlager den grossen anfänglichen Druckunterschied abbaut. Der Abfluss von Wasser aus dem Endlager und somit auch die Freisetzung von gelöstem Gas ist im Rechenfall mit geänderten Anfangsbedingungen während der ersten Zeitperiode wesentlich höher als im Referenzfall.

Für Zeiten nach den ersten 60 Jahren sind die Resultate des Rechenfalls mit geänderten Anfangsbedingungen praktisch gleich wie jene des Referenzfalls.

#### 4.4 Modellierung der dualen Porosität

Im Referenzfall beträgt die Porosität des Oxford 10 %. Aufgrund der Felddaten wurde für die hydraulische Modellierung [2,3,4] eine geringere Fliessporosität angenommen, während nur für die Modellierung der Radionuklid Ausbreitung ein gesamte zugängliche Porosität von 10 % verwendet wurde [9]. Um den Einfluss der vereinfachenden Annahme einer einfachen Porosität im Referenzfall zu überprüfen, wird in einem Rechenfall eine duale Porosität angenommen, wobei als primäre Porosität 2 % und als sekundäre Porosität 8 % angesetzt wird. (Die Bedeutung der primären und der sekundären Porosität sowie deren Behandlung im Programm ECLIPSE wurde in der Einleitung zum Kapitel 2 behandelt.)

Die Resultate der Simulationsrechnungen mit dualer Porosität sind praktisch die gleichen wie im Referenzfall. Die Gasfreisetzung setzt ebenfalls nach 158 Jahren ein und der maximale Druckanstieg beträgt 0,25 bar. Dies zeigt, dass die getroffene vereinfachende

Annahme im Referenzfall gerechtfertigt ist.

#### 4.5 Variation der Permeabilität des Oxford

Die Permeabilität des Oxford bestimmt den Gradienten, welcher notwendig ist, um zunächst das Wasser und später das Gas aus dem Endlager abzuführen. Eine niedrigere Permeabilität erfordert einen höheren Gradienten und damit eine stärkere Druckerhöhung. Diese Abhängigkeit wird mit zwei Rechenfällen untersucht, in denen die Permeabilität des Oxford um 1 bzw. um 2 Grössenordnung verringert wird.

In beiden Rechenfällen setzt die Gasfreisetzung nach 158 Jahren, also zum gleichen Zeitpunkt wie im Referenzfall ein. Wie erwartet, ist die Druckerhöhung stärker. Bei einer Reduktion der Oxford-Permeabilität um 1 Grössenordnung auf  $10^{-16}$  m<sup>2</sup> beträgt die Druckerhöhung 1,31 bar gegenüber 0,26 bar im Referenzfall. Dies zeigt, dass die Druckerhöhung nichtlinear von der Permeabilität abhängt. Im zweiten Rechenfall, bei einer Oxford-Permeabilität von  $10^{-17}$  m<sup>2</sup>, steigt der Druck um 2,31 bar.

Gegenüber dem Umgebungsdruck ist keiner der beiden Werte bedeutend.

#### 4.6 Variation des Kapillardruckes

Damit Gas aus dem Endlager freigesetzt werden kann, muss der Gasdruck im Endlager jenen im Oxford übersteigen. Falls der Kapillardruck im Oxford ansteigt, setzt die Gasfreisetzung erst bei höherem Gasdruck im Endlager ein. Um diese Abhängigkeit und den Einfluss auf den Anstieg des Wasserdruckes zu überprüfen, werden in einem Rechenfall die Kapillardrücke des Oxford und des Kimmeridge um den Faktor 3 erhöht. Bei vollständiger Wassersättigung beträgt der Kapillardruck im Oxford damit 0,15 bar und ist um den Faktor 10 höher als jener im Grubengebäude.

Bis 160 Jahre nach Beginn der Gasproduktion sind die Resultate gleich wie im Referenzfall. Nach dieser Zeit ist der Gasdruck im Endlager aber noch nicht hoch genug, damit die Freisetzung wie im Referenzfall einsetzen kann. Der Gasdruck muss im wesentlichen noch um die Differenz zwischen dem veränderten und dem ursprünglichen Kapillardruck ansteigen. Die Modellergebnisse zeigen, dass der Druckanstieg zu Beginn der Gasfreisetzung den Wert des Referenzfalls um 0,1 bar übersteigt und 0,36 bar beträgt und die Freisetzung nach 430 Jahren erfolgt. Die Gasblase im Endlager ist ungefähr dreimal so dick wie im Referenzfall.

Der gegenüber dem Referenzfall grössere Druckanstieg lässt darauf schliessen, dass neben dem grössräumigen Abfluss des verdrängten Wassers je nach Wert der Prozessparameter auch kleinräumige 2-Phasenprozesse den Druckanstieg mitbestimmen.

#### 4.7 Variation der Gasproduktionsrate

Die Gasproduktionsrate bestimmt die Rate, mit der zunächst Wasser und später Gas aus dem Endlager abgeführt werden muss. Deshalb bewirkt eine höhere Gasproduktionsrate höhere Flüsse und grössere Gradienten im Oxford und somit auch einen stärkeren Druckanstieg. In einem Rechenfall wird die Gasproduktionsrate um den Faktor 3 gegenüber dem Wert im Referenzfall erhöht.

Die Freisetzung setzt nach der dreifach kürzeren Zeit ein als im Referenzfall, also zu dem Zeitpunkt, wo dieselbe Gasmenge produziert worden ist. Der Druckanstieg beträgt 1,00 bar.

## 5 SCHLUSSFOLGERUNGEN

In einem 2-dimensionalen vertikalen Modellschnitt wurde für eine vereinfachte Geometrie die Bildung von Gas im geplanten Endlager Konrad und die Freisetzung und Ausbreitung in den Nebengesteinen Oxford und Kimmeridge numerisch modelliert. Berechnet wurde der Druckaufbau innerhalb und in der Nähe des Endlagers, die Verteilung des Gases in den genannten Gesteinsschichten und die Änderung des regionalen Fließsystems. Die Resultate weisen eine gewisse Unsicherheit auf, da für einzelne Parameter nicht auf standortsspezifische Werte zurückgegriffen werden konnte und Literaturdaten für vergleichbare Gesteine verwendet wurden. Diese Unsicherheiten und der Einfluss einiger Modellannahmen wurden mit Parametervariationen untersucht. Sie zeigten, dass die Ergebnisse in einer Weise von den relativ unsicheren Parametern und Modellannahmen abhängen, welche die Hauptaussagen und Schlussfolgerungen nicht in Frage stellen.

Die Gasfreisetzung aus dem Endlager ins Oxford hängt hauptsächlich von dessen Permeabilität, dem Kapillardruckunterschied zwischen Oxford und Grubengebäude und der Gasproduktionsrate ab. Der Freisetzungsprozess kann in 4 Zeitperioden unterteilt werden:

- Lösung des Gases im Porenwasser des Endlagers
- Bildung einer Gasphase im Endlager und Anstieg der Gassättigung bis zum kritischen Wert (Minimalwert für Mobilität des Gases)
- Bildung einer zusammenhängenden Gasblase unter der Obergrenze des Grubengebäudes, weiterer Anstieg des Druckes
- Freisetzung des Gases ins Nebengestein

Im Referenzfall dauert die erste Zeitperiode 60 Jahre. Anschließend ist das Porenwasser im Endlager mit gelöstem Gas gesättigt, das weiter produzierte Gas baut eine anfänglich immobile Gasphase auf und der Druck steigt. Durch diesen Druckanstieg wird Porenwasser aus dem Endlager ausgepresst und das notwendige Volumen für die Gasphase geschaffen. Dabei bestimmt die Gasproduktionsrate die Rate, mit welcher Wasser abgeführt werden muss. Diese zweite Zeitperiode dauert weitere 70 Jahre.

Während der dritten Zeitperiode ist das Gas mobil, wandert nach oben und bildet unter der Obergrenze des Grubengebäudes eine zusammenhängende Gasblase. Damit das Gas ins Oxford freigesetzt werden kann, muss der Gasdruck (Wasserdruck + Kapillardruck) im Endlager jenen im Oxford übersteigen. Bis diese Bedingung erfüllt ist, steigt der Druck im Endlager weiter an. Bei beginnender Gasfreisetzung, am Ende der dritten Zeitperiode, ist der Druckanstieg maximal und beträgt im Referenzfall 0,26 bar. Die Gasblase weist eine Dicke von 0,4 m auf. Mitbestimmend für den Druckanstieg ist der für den grossräumigen Abfluss des verdrängten Wassers notwendige hydraulische Gradient. Aus diesem Grunde wurde

der Betrag des Druckanstiegs nicht nur mit dem 2-dimensionalen, räumlich beschränkten 2-Phasenmodell sondern zusätzlich mit dem 3-dimensionalen, stationären 1-Phasenmodell (Störzonenmodell, Programm FEM301 [2]) ermittelt. Dieses ergibt einen Druckanstieg im Endlagerbereich von 0,15 bar.

Die Gasfreisetzung setzt an der oberen Ecke des Endlagers auf der Abstromseite (Nordende) ein, erst verzögert und in untergeordnetem Ausmass wird auch Gas an der oberen Ecke auf der Zustromseite freigesetzt. Das freigesetzte Gas steigt praktisch senkrecht zum oberen Modellrand und baut dort langsam eine ausgedehnte Gasblase auf. Die Gassättigung im Bereich des aufsteigenden Gases erhöht sich nur soweit, dass das Gas mobil ist und abströmen kann.

Der Wasserfluss in der Endlagerumgebung ändert sich. Durch die Bildung von Gasphasen zunächst im Endlager und später im Oxford und Kimmeridge wird Wasser verdrängt. Zudem bildet der nur teilweise wassergesättigte Bereich im Oxford und Kimmeridge einen Strömungswiderstand, da mit der sinkenden Wassersättigung die Wasserdurchlässigkeit abnimmt. Oberhalb des Endlagers dreht die Strömung während eines ersten Zeitabschnittes nach oben und, im südlichen Modellbereich, gegen Süden, dem regionalen, Süd-Nord gerichteten Fliessfeld entgegen. Sobald die aufsteigenden Gase an der Basis der Unterkreide eine Blase bilden und damit Wasser verdrängen, ändert sich das Fliessfeld erneut. Praktisch im gesamten Modell stellt sich ein abwärts gerichtetes Fliessfeld ein. Aufwärts gerichtete Flüsse treten nur in eng begrenzten Bereichen oberhalb des nördlichen und des südlichen Endlagerendes auf.

Wegen der verhältnismässig nahen Grenzen zu den schlecht durchlässigen Schichten im Hangenden, im Liegenden und im Süden (undurchlässige Modellgrenzen) kann das abgepresste Wasser in der 2-dimensionalen Modellierung nur nach Norden abfliessen. Durch die in Wirklichkeit unregelmässige und nicht horizontale Obergrenze des Grubengebäudes wird die Gasfreisetzung an einer oder mehreren, auch in Ost-West Richtung begrenzten Stellen einsetzen, so dass der regionale Süd-Nord Fluss im Gegensatz zu den Resultaten des 2D-Modells vorwiegend durch den generellen Druckanstieg im Endlagerbereich und weniger durch die aufsteigenden Gasblasen verändert werden dürfte.

Mit dem abgepressten Wasser können Radionuklide aus dem Endlager in die Geosphäre freigesetzt werden. Die abgepresste Wassermenge erreicht nach etwa 160 Jahren den Maximalwert von etwa  $420 \text{ m}^3/\text{a}$  (bezogen auf das ganze Endlager) und ist damit geringer als die in [2 bzw. 10] berechneten Werte des Endlagerdurchflusses ohne Gasproduktion aufgrund des grossräumigen hydraulischen Gradienten von rund  $630 \text{ m}^3/\text{a}$ , bzw.  $1620 \text{ m}^3/\text{a}$  und  $3200 \text{ m}^3/\text{a}$ . Durch die Gasproduktion wird die Freisetzung der Radionuklide aus dem Endlager damit nicht drastisch erhöht.

Fliesswege von freigesetztem Wasser aus dem Endlager können in

ausgeprägterem Masse nach oben, gegen die Unterkreide führen als ohne Gasproduktion. Dadurch erhöht sich die Möglichkeit, dass Wasser aus dem Endlager zur Bohrung Bleckenstedt 1 gelangt. (Die hydraulische Wirkung der Bohrung Bleckenstedt 1 wurde in [3] diskutiert.) Die Modellierung zeigt aber auch, dass wegen der undurchlässigen Schicht im Hangenden die induzierten vertikalen Gradienten klein bleiben (vgl. Abbildung 4-4), so dass sich die Fliesszeiten zur Bohrung Bleckenstedt 1 nicht in sicherheitsrelevantem Ausmass ändern dürften. Zudem ist die Änderung des Fliesssystems von zeitlich beschränkter Dauer und erstreckt sich nicht einmal über die Transportzeit vom Endlager zur Bohrung Bleckenstedt 1 für nichtsorbiierende Nuklide unter ungünstigen hydraulischen Bedingungen (z.B. Rechenfall R16 in [9]). Auf die Freisetzung von Radionukliden entlang anderen Fliesswegen hat die Druckerhöhung und die Änderung des Fliesssystems in der Endlagerumgebung keinen signifikanten Einfluss.

Selbst bei reduzierter Permeabilität des Oxford und der entsprechend stärkeren Druckerhöhung im Endlager bleibt der Einfluss beschränkt. Der Druckanstieg im Endlager breitet sich nach oben ins Kimmeridge aus und erhöht damit den vertikalen Gradienten in den darüberliegenden Deckschichten der Unterkreide auf annähernd den doppelten Wert (gemäss der 2-dimensionalen Modellierung). Diese Aussage muss insofern relativiert werden, als mit der 2-dimensionalen Modellierung der Druckanstieg überschätzt wird, die Reichweite des Druckanstiegs begrenzt ist und nach der 3-dimensionalen hydraulischen Modellierung [2] mögliche Freisetzungspfade vom Endlager steil nach oben durch die Deckschichten erst in einigem Abstand nördlich des Endlagers verlaufen. Zudem dauert auch diese Druckerhöhung nur eine begrenzte Zeit. Auf die weiter nach Norden verlaufenden Pfade hat die Druckerhöhung einen entsprechend geringeren Einfluss.

Die Gasblase an der Obergrenze des Kimmeridge wächst, solange die Gasproduktion anhält (5000 Jahre). Der Referenzfall wurde bis 15 000 Jahre gerechnet. Selbst nach dieser Zeit befindet sich die Blase noch ungefähr am selben Ort, sie wird durch den regionalen Wasserfluss nur wenig nach Norden verschoben. Ihr Abbau erfolgt nur durch den Abtransport von Gas in gelöster Form mit dem Tiefengrundwasser.

Die Parametervariationen wurden derart gewählt, dass ungünstigere Ergebnisse, das heisst stärkere Druckerhöhungen resultieren. Damit soll gezeigt werden, dass mit veränderten Parametern die relativ geringe Druckerhöhung des Referenzfalls nicht auf bedenkliche Werte anwächst. Die Variationen decken konservative Parameterintervalle ab, wobei nicht gleichzeitig mehrere Parameter verändert wurden. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5-1 zusammengefasst. Keine der Parametervariationen ergibt ein Resultat, welches für die Integrität des Endlagers von Einfluss ist.

Die Verminderung der Permeabilität des Oxford verstärkt nur die Druckerhöhung im Endlager, die anderen Resultate bleiben unbeein-

flusst.

Die Resultate zeigen praktisch keine Abhängigkeit von den gewählten Anfangsbedingungen. Die Druckverteilung gleicht sich bis zum Zeitpunkt, wo sich freies Gas bildet, praktisch aus.

Der Rechenfall mit dualer Porosität im Oxford zeigt, dass die Modellierung mit einfacher Porosität zulässig ist; die Resultate sind praktisch gleich wie im Referenzfall.

Die Erhöhung des Kapillardrucks im Oxford hat sowohl einen Einfluss auf die Druckerhöhung (grösser), auf den Zeitpunkt der beginnenden Gasfreisetzung (verzögert) als auch auf die Dicke der Gasblase im Endlager (grösser).

Die Erhöhung der Gasproduktionsrate beschleunigt den Beginn der Gasfreisetzung und erhöht den Druckanstieg, hat aber keinen Einfluss auf die Blasendicke.

Die Gasausbreitung wird am stärksten durch die Durchlässigkeit des Oxford, die Kapillardrücke von Oxford und Grubengebäude und durch die Gasproduktionsrate beeinflusst. In allen betrachteten Rechenfällen liegt der Druckanstieg im Endlager unter 2,3 bar. Der Druckanstieg hängt sowohl vom grossräumigen Abfluss des verdrängten Wassers als auch von kleinräumigen 2-Phasenprozessen ab.

LITERATURVERZEICHNIS

Nr.	Autor	Titel
1a	Appleyard et al.	Appleyard, J., Cheshire, I.M., Reservoir Modelling: Fully Implicit Simulation Methods, in "Enhances Oil Recovery" ed. by J. Fayers, Elsevier Publishing
1b	Appleyard et al.	Appleyard, J., Cheshire, I.M., Nested Factorization, Reservoir Simulation Symposium, SPE 12264 (1983)
1c	Holmes	Holmes, J.A., Enhancements to the Strongly Coupled, Fully Implicit Well Model: Wellbore Crossflow Modeling and Collective Well Control, Reservoir Simulation Symposium, SPE 12259 (1983)
2	MCI	Schachtanlage Konrad, Salzgitter: Modellrechnungen mit dem Programm FEM301 für ein alternatives geologisches/hydrogeologisches Modell. Schlussbericht. 4 Bände, 15.11.1988
3	COLENCO	Schachtanlage Konrad, Salzgitter: Modellrechnungen mit dem Programm FEM301 für ein alternatives geologisches/hydrogeologisches Modell. Auswirkung der bestehenden Tiefbohrungen. 17.08.1989
4	COLENCO	Schachtanlage Konrad, Salzgitter: Modellrechnungen mit dem Programm FEM301 für ein alternatives geologisches/hydrogeologisches Modell. Rechnungen zum Schachtverschluss. 17.08.1989
5	Brooks et al.	Brooks, R.H., Corey, A.T., Properties of Porous Media Affecting Fluid Flow, Proc. Am. Soc. Civil Engr., Irrigation and Drainage Div., 1966
6	King	King, L.G., Description of Soil Characteristics for Partially Saturated Flow, Soil Sci. Soc. Am. Proc., <u>29</u> , 359 (1965)
7	Frick et al.	Frick, T.C., Taylor R.W., Petroleum Production Handbook, SPE, Dallas, Chapter 19
8	Perry	Perry, J.M., Ed., Chemical Engineering Handbook, p. 14-3, McGraw Hill, New York (1963)

- 9            COLENCO            Schachtanlage Konrad, Salzgitter: Einfluss der bestehenden Tiefbohrungen und des Schachtverschlusses, Modellierung der Radionuklidausbreitung. 1989 (in Vorbereitung, Berichtentwurf August 1989)
- 10           PTB                    Plan Endlager für radioaktive Abfälle - Schachtanlage Konrad Salzgitter, September 1989

TABELLEN

- 3-1 Permeabilitäten und Porositäten der Festphasen
- 3-2 Parameter der Brooks-Corey Beziehungen
- 5-1 Zusammenfassung der Resultate

Festphase	Permeabilität $k \text{ [m}^2\text{]}$	Porosität $\phi^0 \text{ [-]}$
Grubengebäude	$1 \cdot 10^{-11}$	0,10
Oxford	$1 \cdot 10^{-15}$	0,10
Kimmeridge	$1 \cdot 10^{-16}$	0,10

Tabelle 3-1: Permeabilitäten und Porositäten der Festphasen

Festphase	$s_{wr}$	$s_{gr}$	$\lambda$	$P_b \text{ [bar]}$
Grubengebäude	0,200	0,020	1,80	0,015
Oxford	0,275	0,035	1,65	0,050
Kimmeridge	0,350	0,050	1,50	0,075

Tabelle 3-2: Parameter der Brooks-Corey Beziehungen  
 $s_{wr}$ : Irreduzible Wassersättigung  
 $s_{gr}$ : Kritische Gassättigung

Rechenfall	$T_r$ [a]	$\Delta p_{max}$ [bar]	$H_b$ [m]
Referenzfall	158	0,26	0,4
Veränderte Anfangsbed.	158	0,26	0,4
Oxford-Permeabilität reduziert um Faktor 10	158	1,31	0,1
reduziert um Faktor 100	159	2,31	0,1
Erhöhter Kapillardruck im Oxford und Kimmeridge	430	0,36	1,3
Duale Porosität im Oxford	158	0,25	0,4
Gasproduktionsrate um Faktor 3 erhöht	52	1,00	0,4
3D 1-Phasenmodellierung mit Volumenquelle (R01 in [2])	-	0,15	-

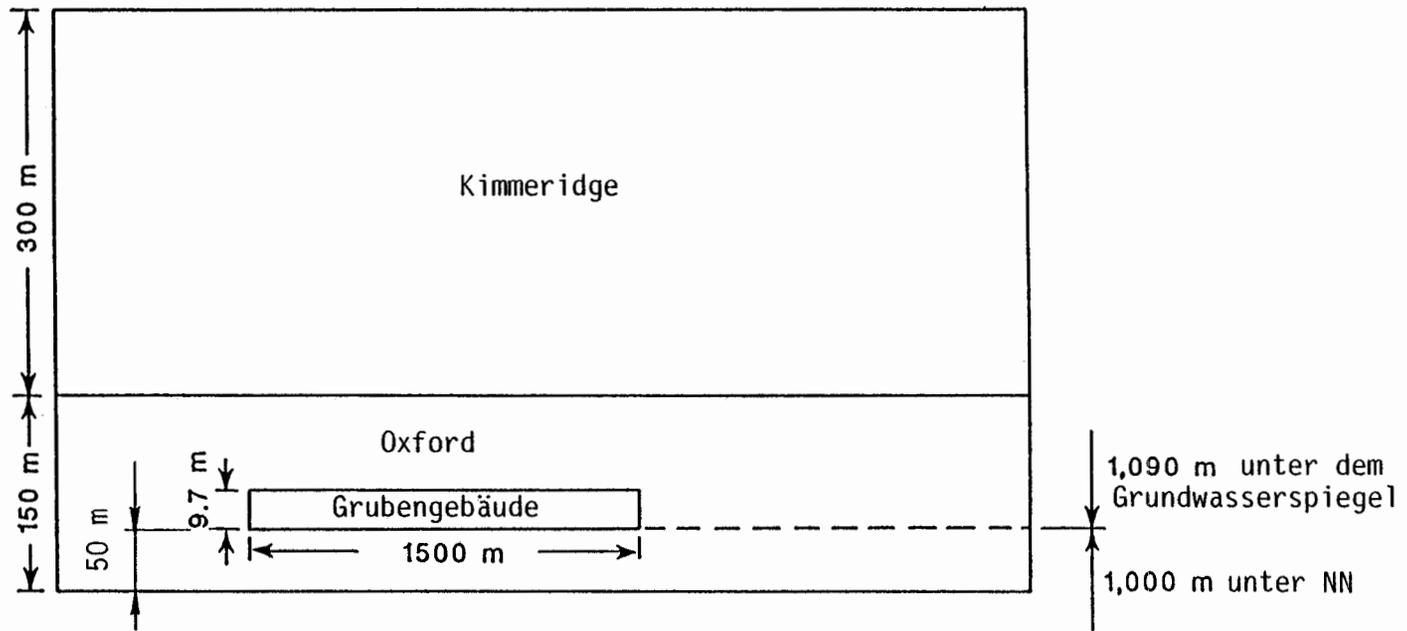
Tabelle 5-1: Zusammenfassung der Resultate

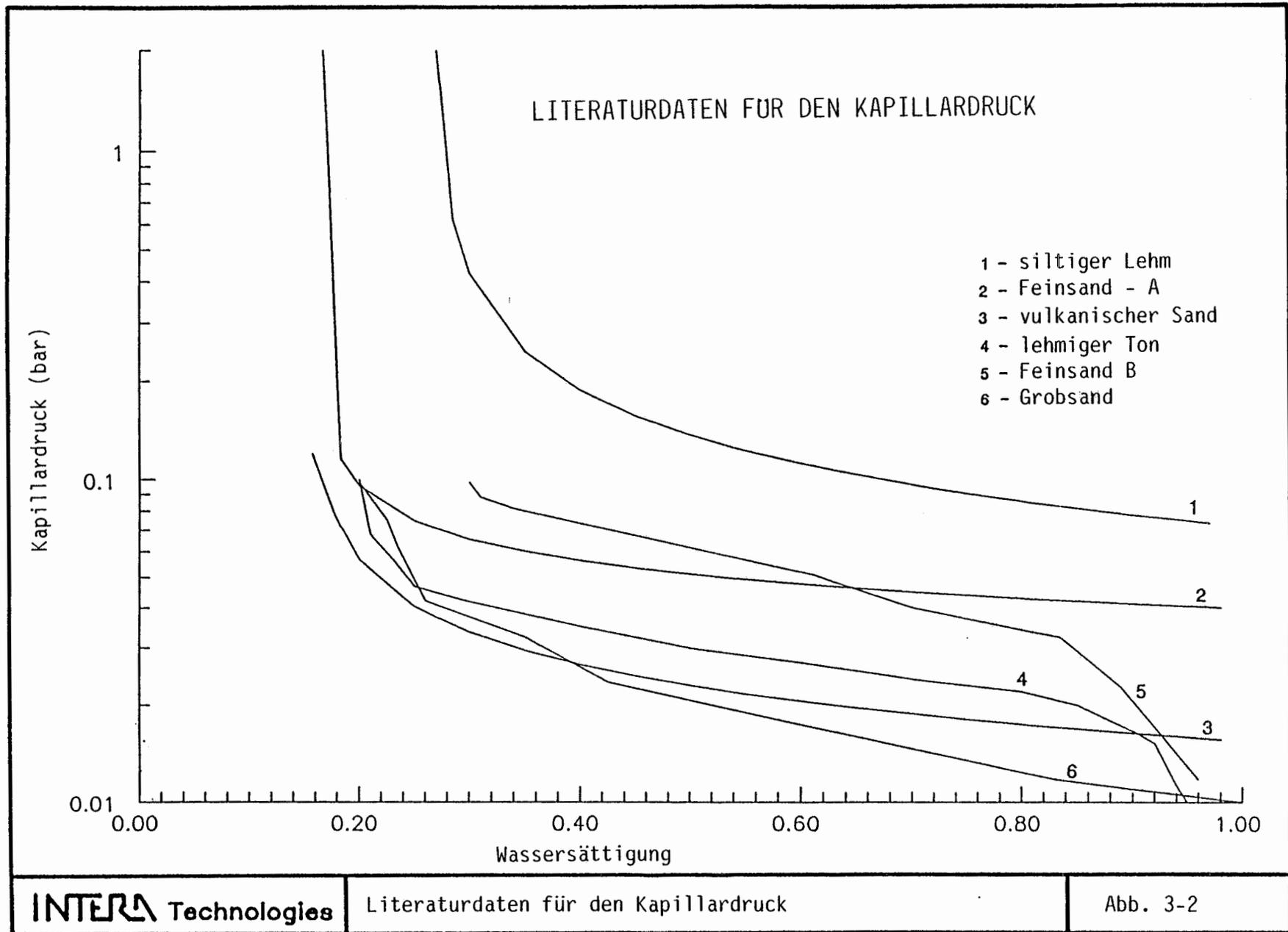
$T_r$  : Zeitpunkt des Beginns der Gasfreisetzung  
 $\Delta p_{max}$ : Maximale Druckerhöhung im Endlager  
 $H_b$  : Dicke der Gasblase im Endlager

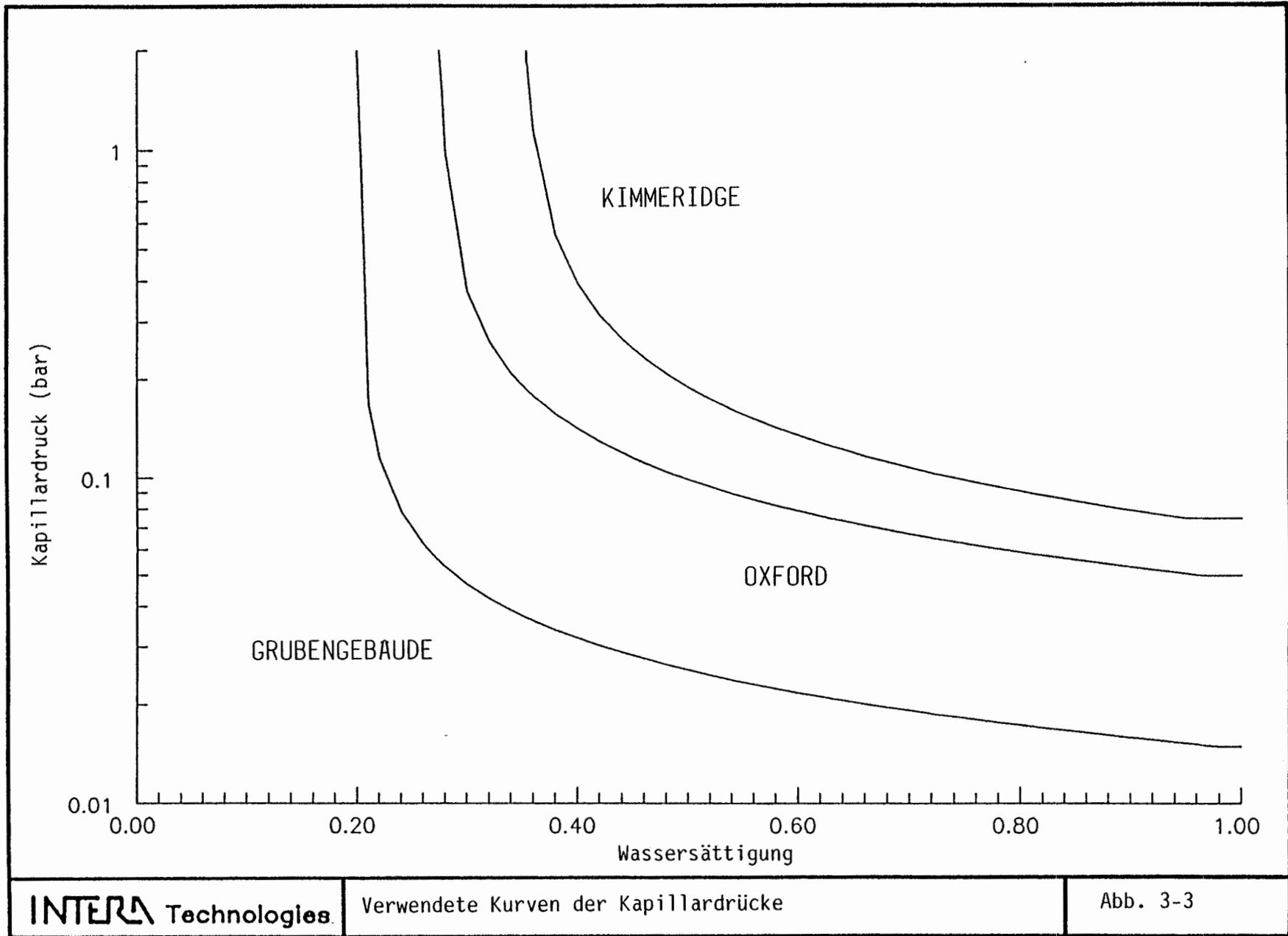
ABBILDUNGEN

- 3-1 Geometrischer Aufbau des Modells (nicht-massstabsgetreu)
- 3-2 Literaturdaten für den Kapillardruck
- 3-3 Verwendete Kurven der Kapillardrücke
- 3-4 Relative Durchlässigkeiten im Grubengebäude
- 3-5 Relative Durchlässigkeiten im Oxford
- 3-6 Relative Durchlässigkeiten im Kimmeridge
- 3-7 Wasserstofflöslichkeit in Wasser als Funktion des Druckes
- 3-8 Diskretisierung des Modells
- 4-1 Schematische Darstellung des Fliessystems im Anfangszustand (Referenzfall)
- 4-2 Vertikalprofile des Wasserdruckes im Anfangszustand an 3 Orten (Referenzfall)
- 4-3 Vertikalprofile des Gasdruckanstiegs nach 60 Jahren an 3 Orten (Referenzfall)
- 4-4 Vertikalprofile des Gasdruckanstiegs nach 155 Jahren an 3 Orten (Referenzfall)
- 4-5 Gasdruck im Endlager und im Oxford in der oberen Endlagerecke auf der Abstromseite als Funktion der Zeit (Referenzfall)
- 4-6 Gassättigung (Gasphase) nach 190 Jahren (Referenzfall)
- 4-7 Gassättigung (Gasphase) nach 1000 Jahren (Referenzfall)
- 4-8 Gassättigung (Gasphase) nach 5000 Jahren (Referenzfall)
- 4-9 Richtung des Wasserflusses in der Umgebung des Endlagers nach 165 Jahren (Referenzfall)
- 4-10 Richtung des Wasserflusses in der Umgebung des Endlagers nach 1000 Jahren (Referenzfall)
- 4-11 Freisetzung von Gas aus dem Endlager in gelöster Phase (Referenzfall)
- 4-12 Freisetzung von Gas in Gasphase aus dem Endlager (Referenzfall)

4-13 Freisetzung von Gas aus dem Endlager in gelöster Phase  
(Variation der Anfangsbedingungen)



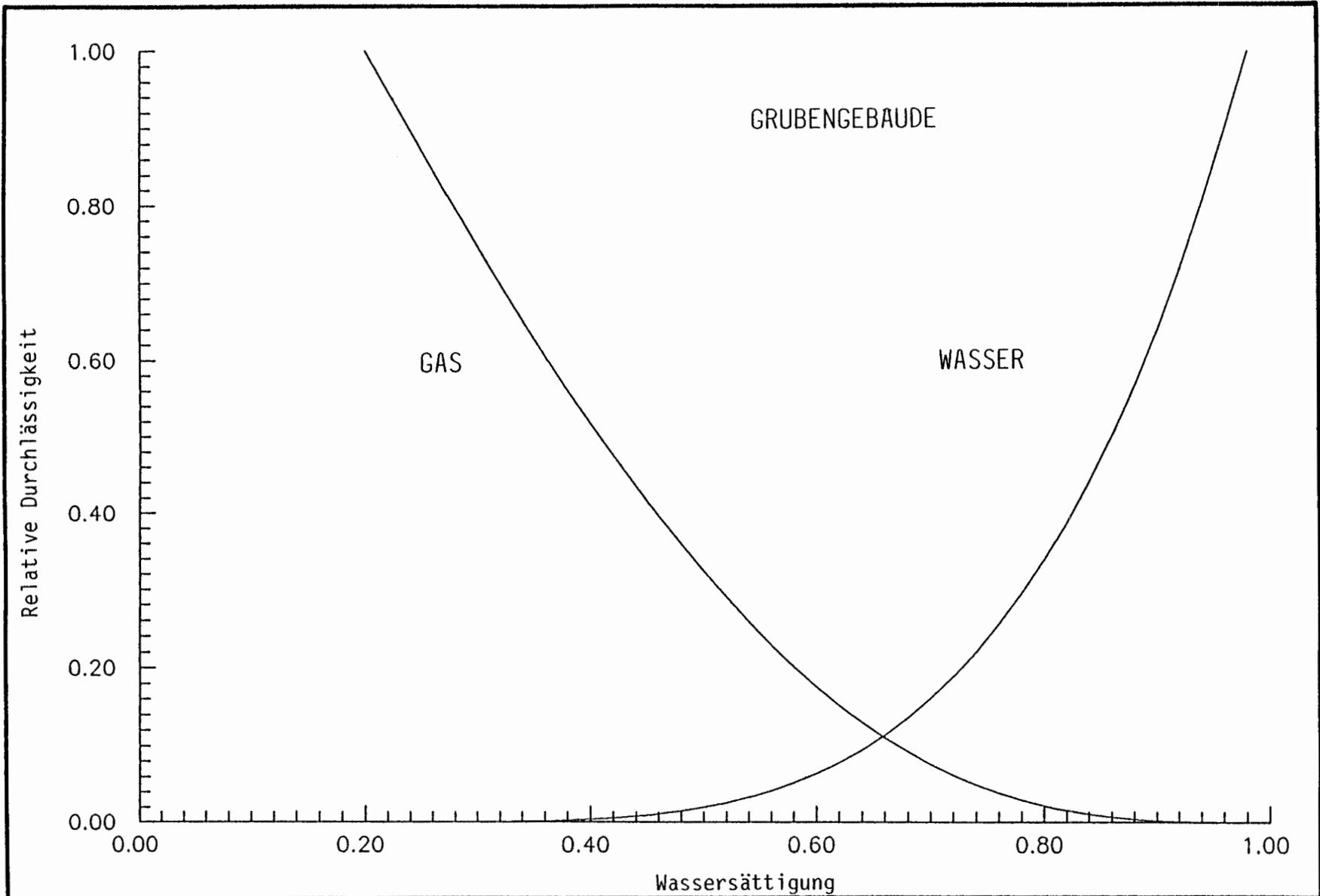




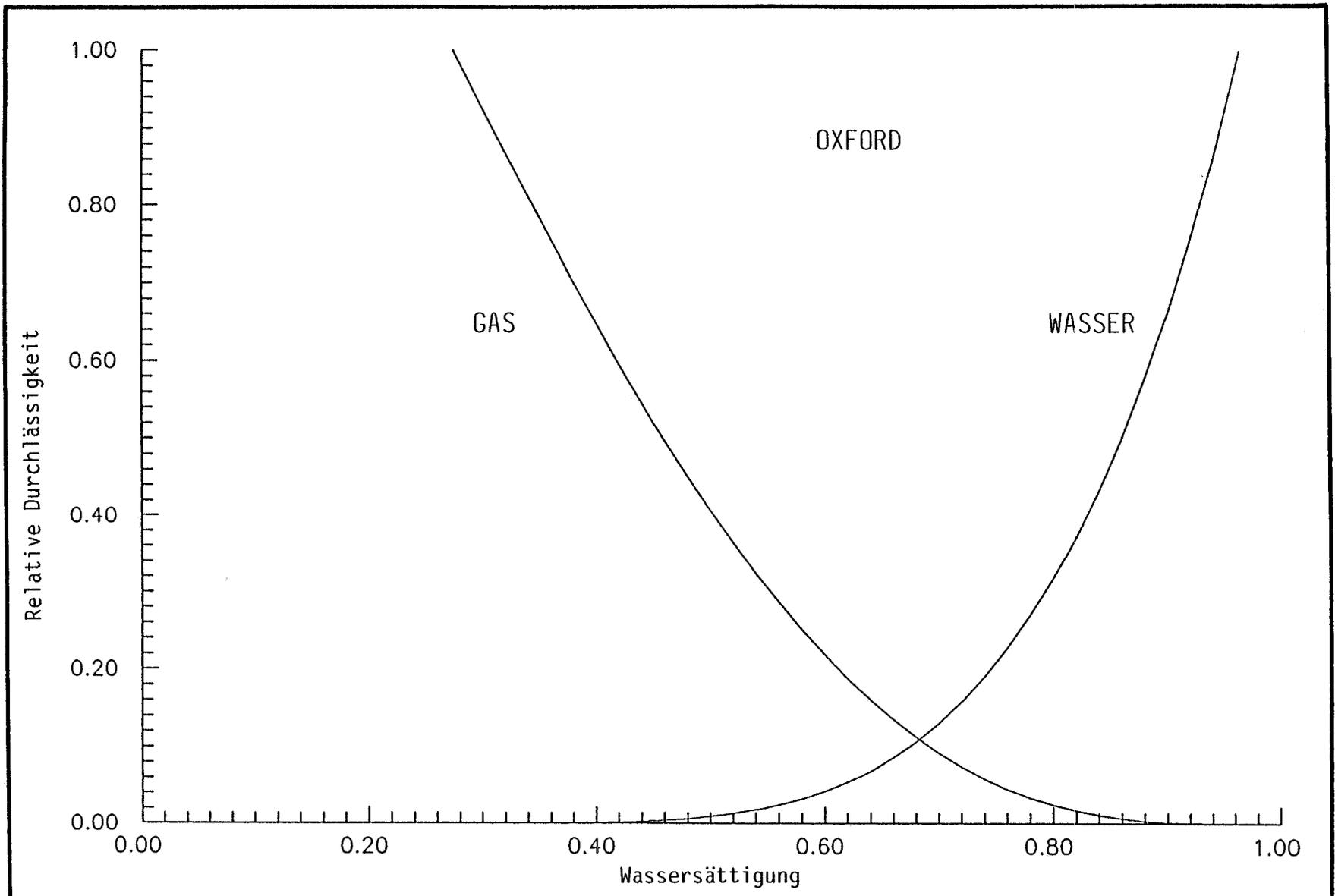
**INTERA Technologies**

Verwendete Kurven der Kapillardrücke

Abb. 3-3



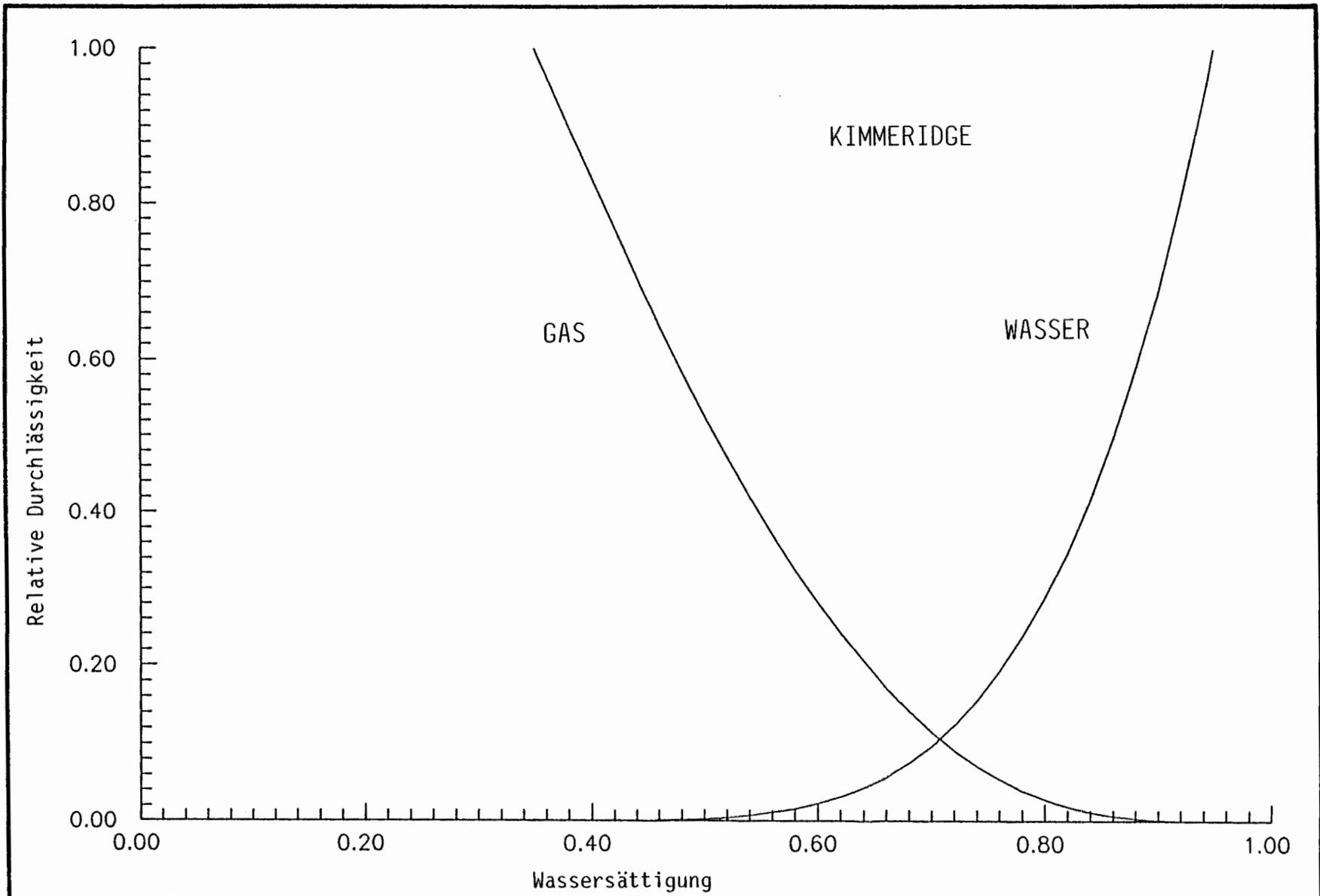
<b>INTERA Technologies</b>	Relative Durchlässigkeiten im Grubengebäude	Abb. 3-4
----------------------------	---	----------



**INTERA Technologies**

Relative Durchlässigkeiten im Oxford

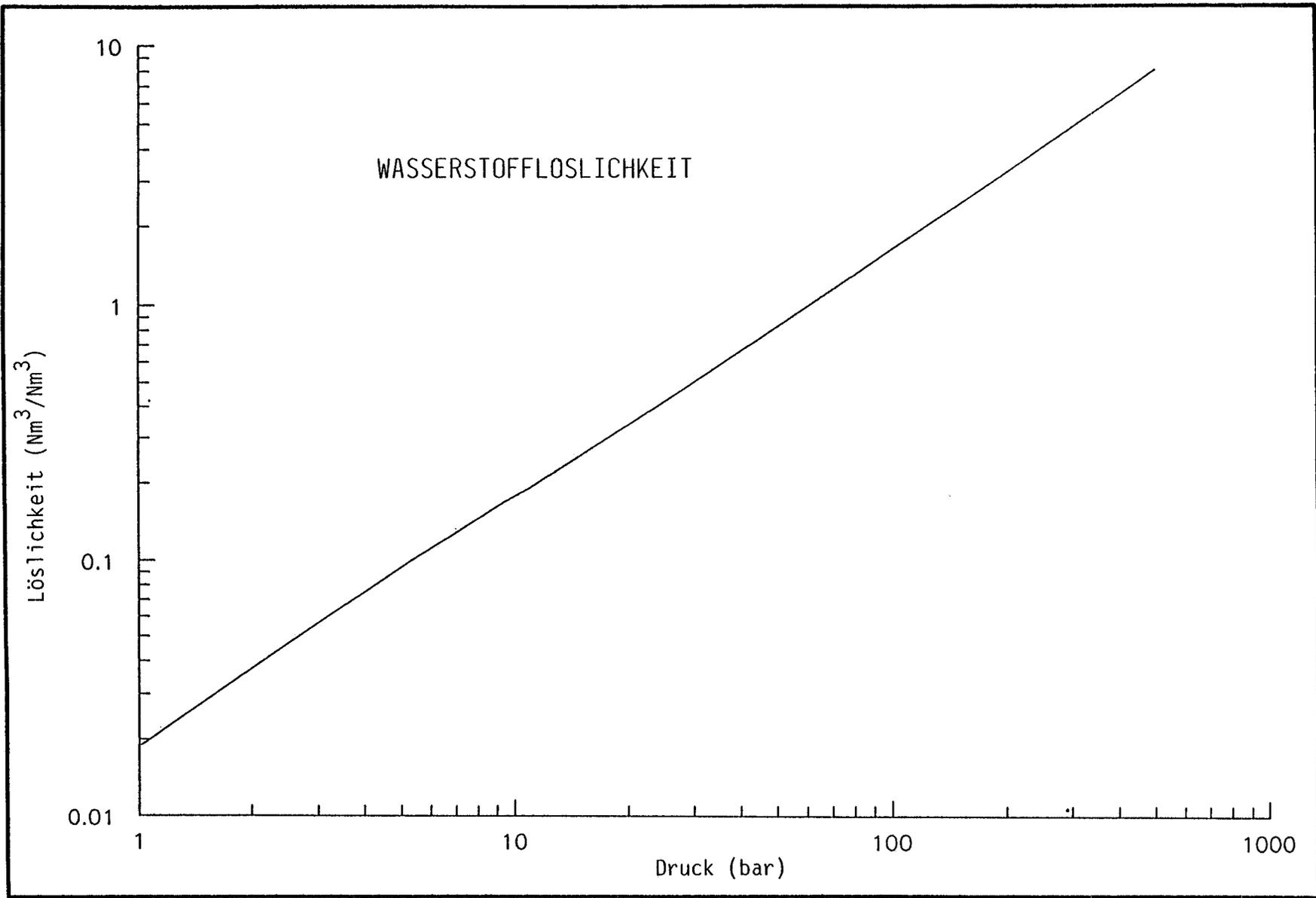
Abb. 3-5

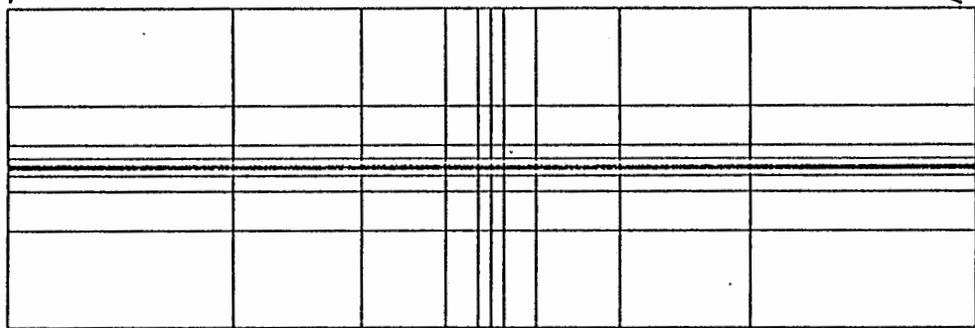
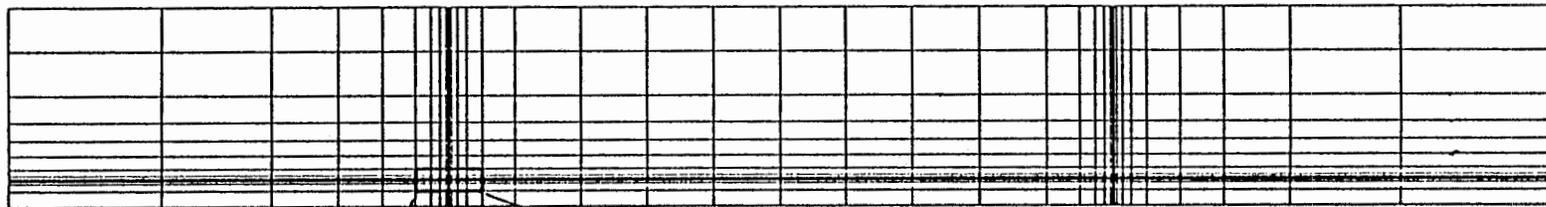


**INTERA Technologies**

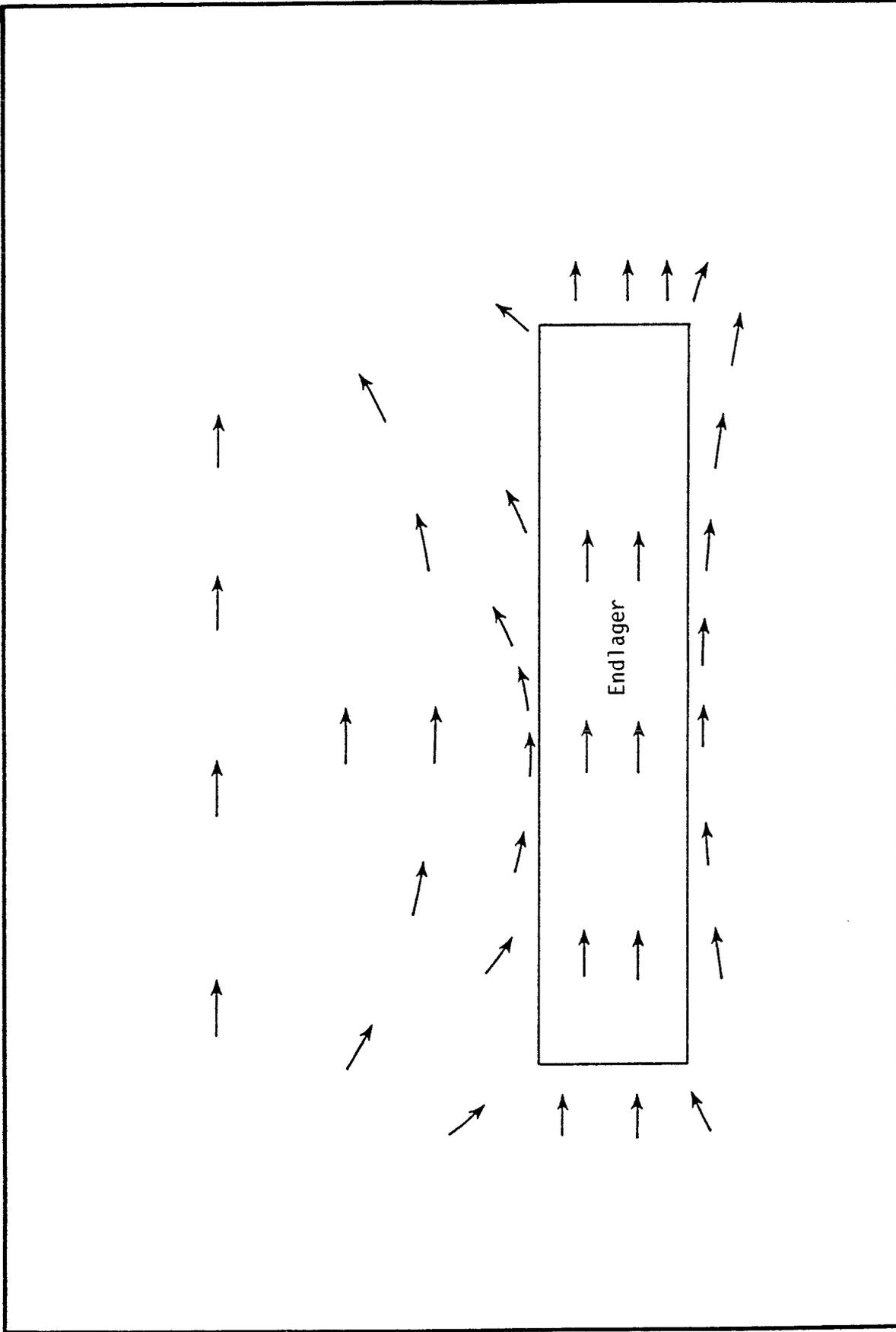
Relative Durchlässigkeiten im Kimmeridge

Abb. 3-6



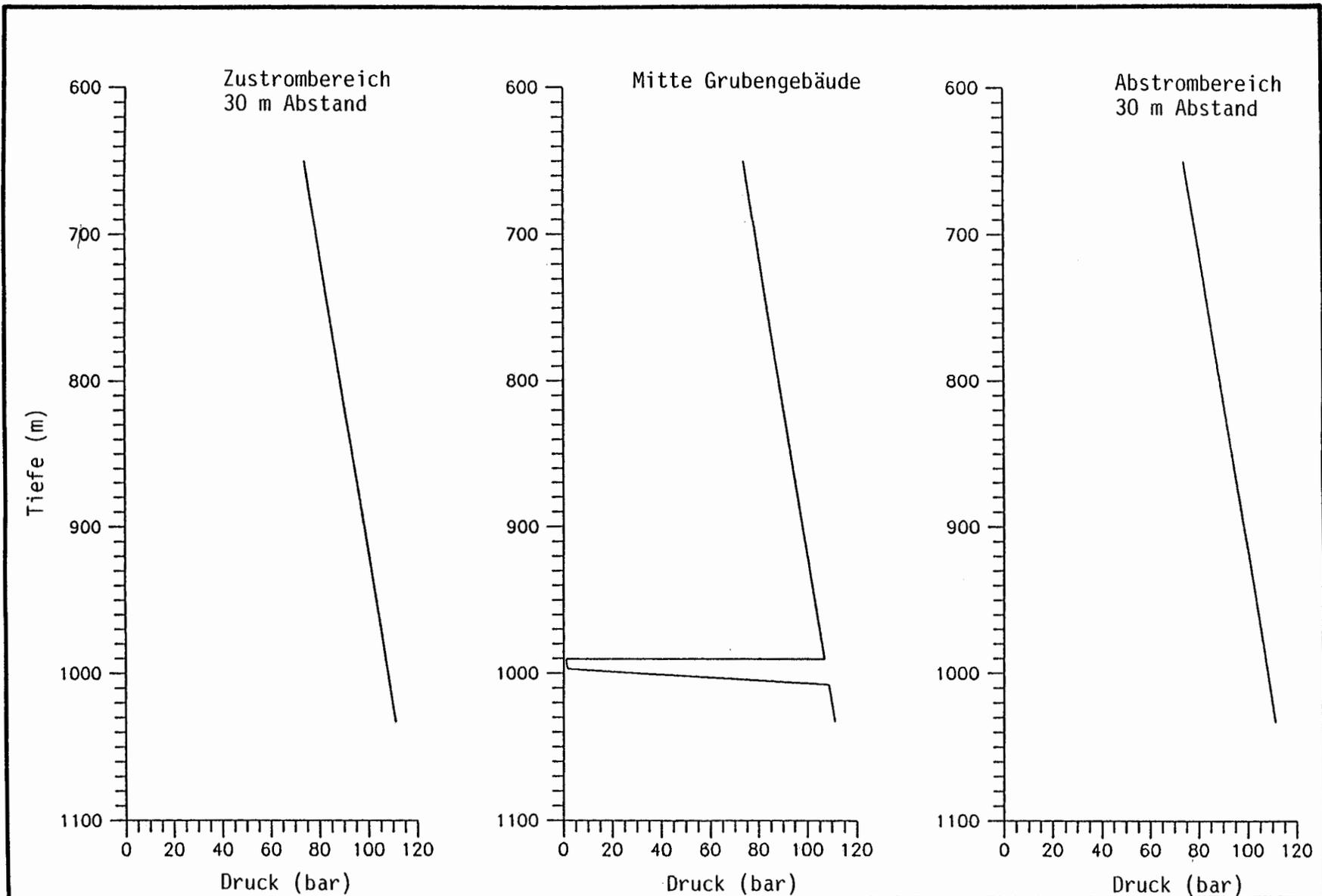


Grubengebäude



Schematische Darstellung des Fließsystems im Anfangszustand (Referenzfall)

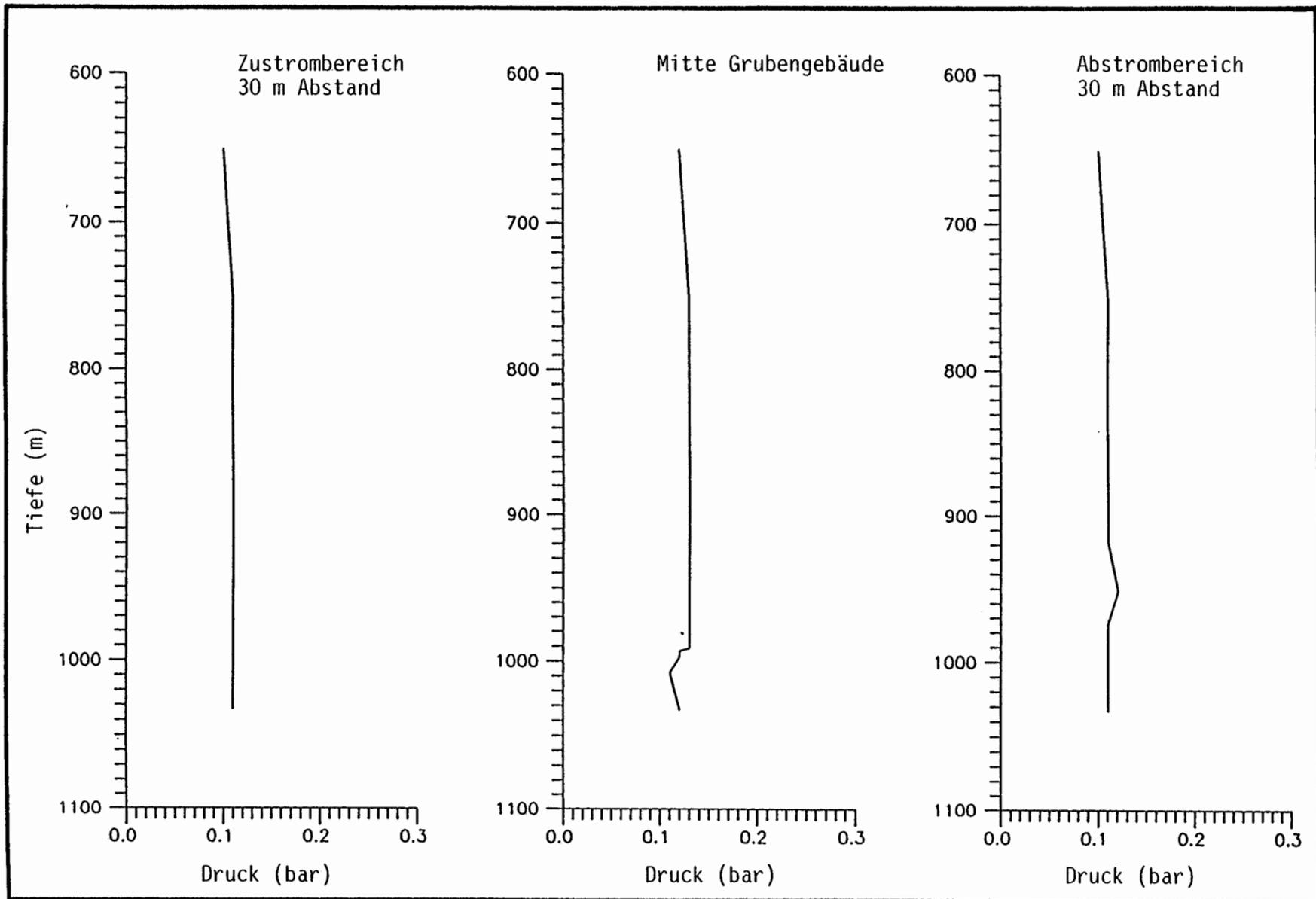
Abb. 4-1



**INTERA Technologies**

Vertikalprofile des Wasserdruckes im Anfangszustand an 3 Orten (Referenzfall)

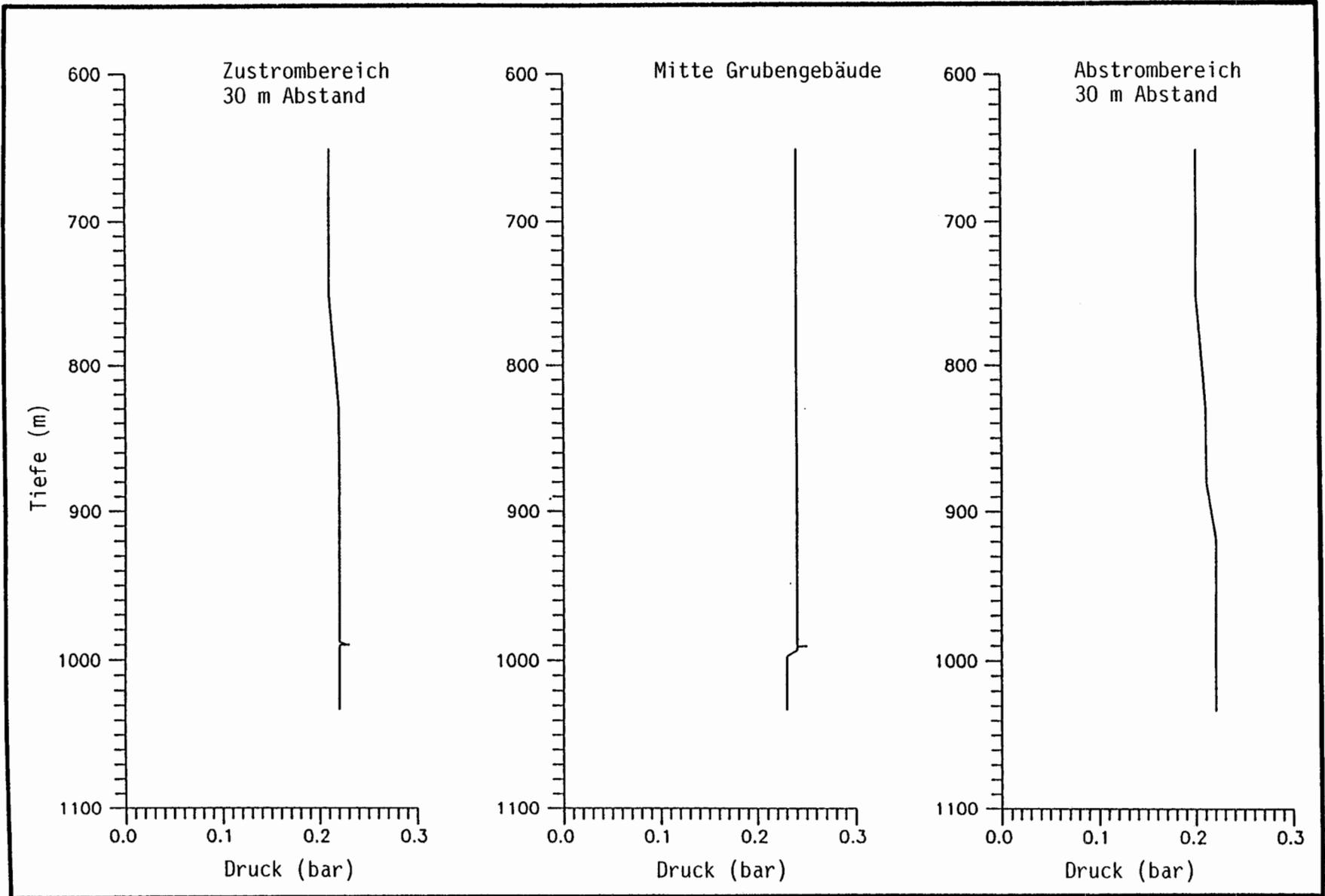
Abb. 4-2



**INTERA Technologies**

Vertikalprofile des Gasdruckanstiegs nach 60 Jahren an 3  
Orten (Referenzfall)

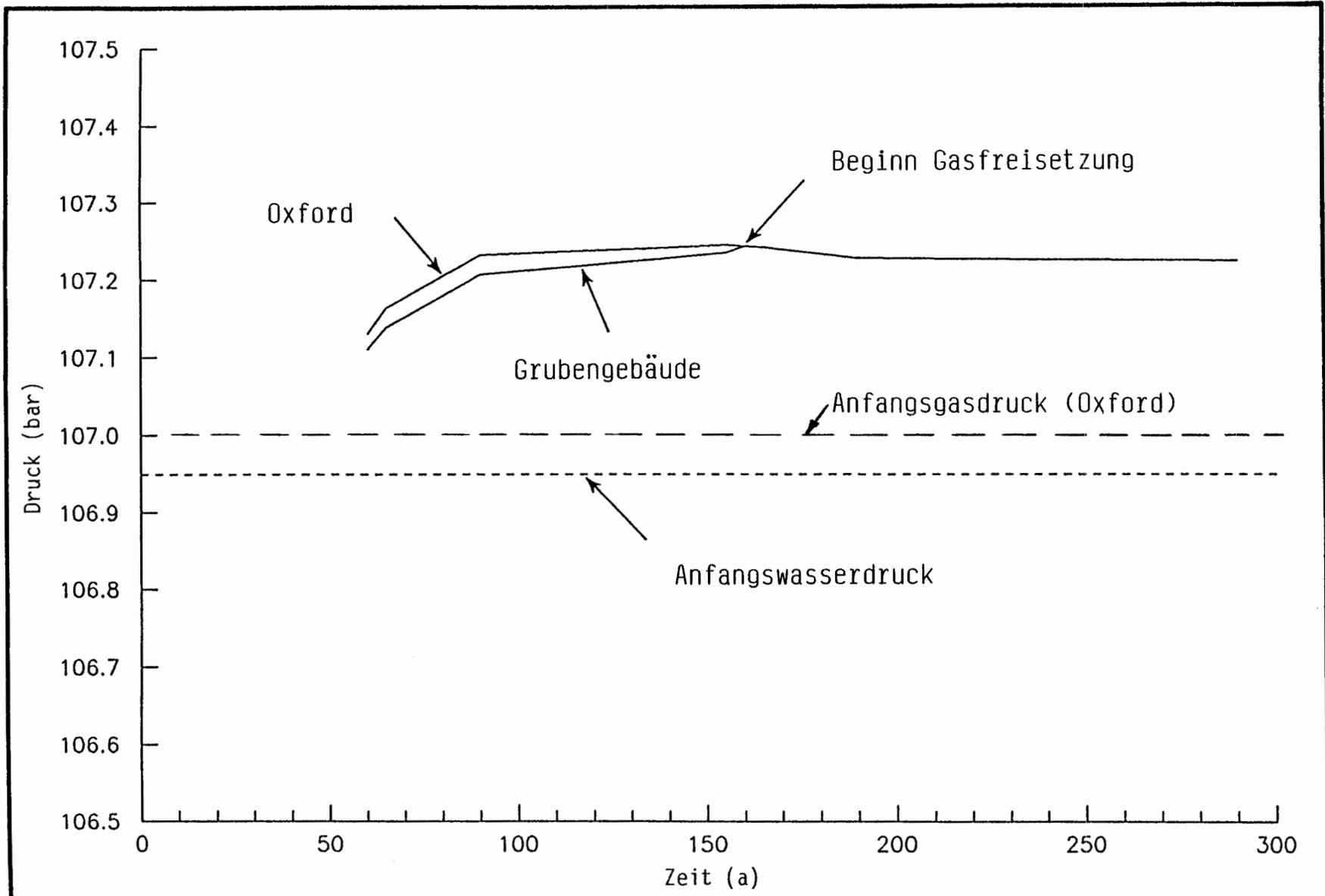
Abb. 4-3



**INTERA Technologies**

Vertikalprofile des Gasdruckanstiegs nach 155 Jahren an 3 Orten (Referenzfall)

Abb. 4-4

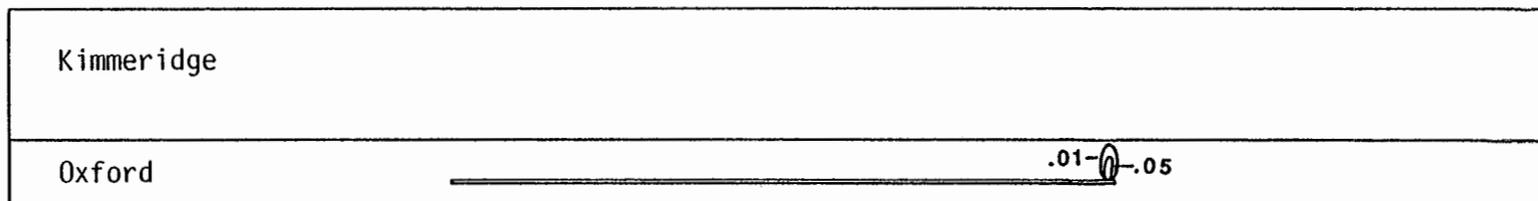


**INTERA Technologies**

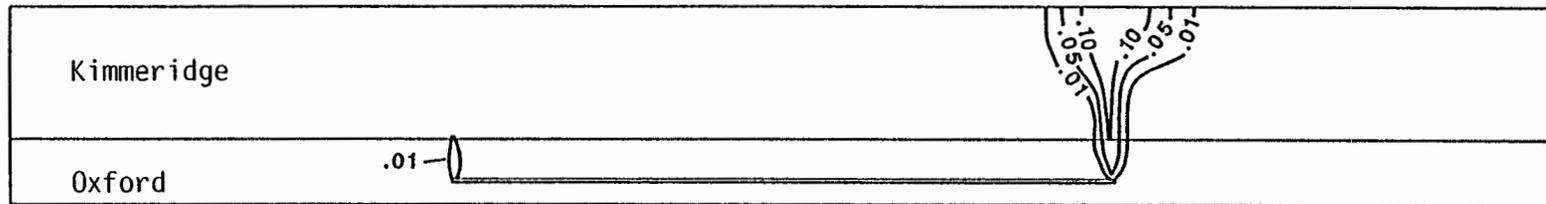
Gasdruck im Endlager und im Oxford in der oberen Endlager-  
ecke auf der Abstromseite als Funktion der Zeit

Abb. 4-5

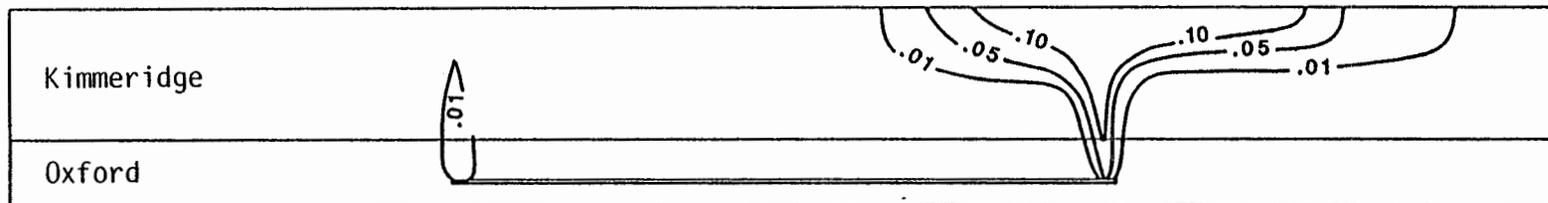
Gassättigung (Gasphase) nach 190 Jahren (Referenzfall)

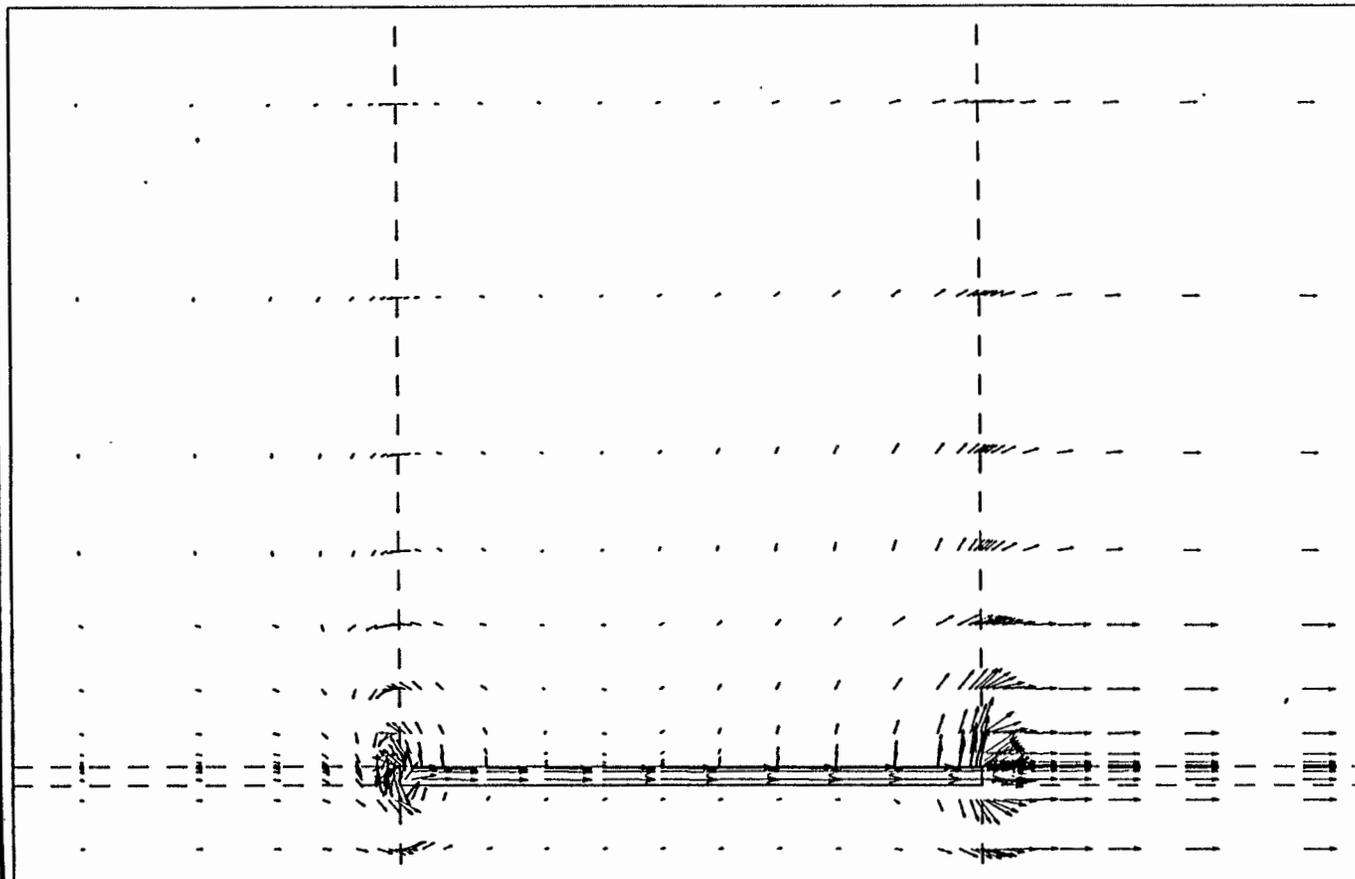


Gassättigung (Gasphase) nach 1000 Jahren (Referenzfall)



Gassättigung (Gasphase) nach 5000 Jahren (Referenzfall)





Filter-  
geschwindigkeit  
m/Tag

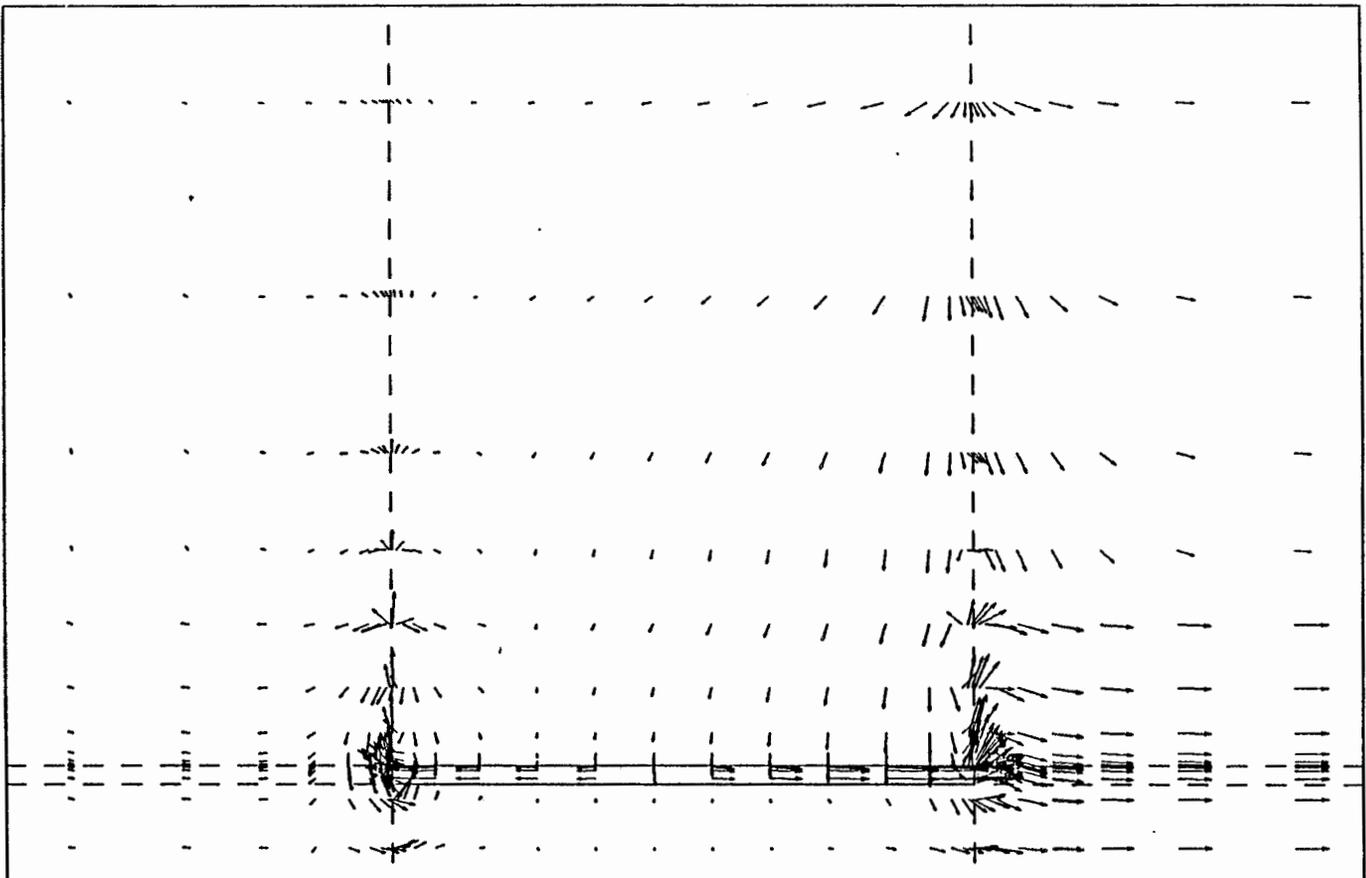
- 1.0E-04 →
- 1.0E-05 —
- 1.0E-06 -
- 1.0E-07 ·
- 1.0E-08 ·
- 1.0E-09 ·

Vertikale Ueberhöhung: 5-fach

**INTERA** Technologies

Richtung des Wasserflusses in der Umgebung des Endlagers  
nach 165 Jahren (Referenzfall)

Abb. 4-9



Filter-  
geschwindigkeit  
m/Tag

- 1.0E-04 →
- 1.0E-05 —
- 1.0E-06 -
- 1.0E-07 -
- 1.0E-08 ·
- 1.0E-09 ·

Vertikale Ueberhöhung: 5-fach

