

## DECKBLATT

| Projekt | PSP-Element | Obj. Kenn. | Aufgabe | UA | Lfd. Nr. | Rev. |
|---------|-------------|------------|---------|----|----------|------|
|         |             |            |         | AA | NNNN     | NN   |
| EU 462  | 9K          | -          | EGA     | BV | 0013     | 01   |

**Titel der Unterlage:**

Stellungnahme des BfS zur Langzeitsicherheit  
Konrad - Gasausbreitung im Gebirge

**Seite:**

I.

**Stand:**

28.04.92

**Ersteller:**

ET 2.4/

**Textnummer:**

**Stempelfeld:**

PSP-Element TP.....: /.

zu Plan-Kapitel: 3.9

PL



6/3/92

Freigabe für Behörden

PL



6/5/92

Freigabe im Projekt

Diese Unterlage unterliegt samt Inhalt dem Schutz des Urheberrechts sowie der Pflicht zur vertraulichen Behandlung auch bei Beförderung und Vernichtung und darf vom Empfänger nur auftragsbezogen genutzt, vervielfältigt und Dritten zugänglich gemacht werden. Eine andere Verwendung und Weitergabe bedarf der ausdrücklichen Zustimmung des BfS.

# Revisionsblatt

# BfS

|        |         |                     |             |           |     |          |      |
|--------|---------|---------------------|-------------|-----------|-----|----------|------|
| EU 462 | Projekt | PSP-Element         | Obj. Kenn.  | Aufgabe   | UA  | Lfd. Nr. | Rev. |
|        | N A A N | N N N N N N N N N N | N N N N N N | X A A X X | A A | N N N N  | N N  |
|        | 9K      | -                   | -           | ECA       | BV  | 0013     | 00   |

**Titel der Unterlage:**  
 Stellungnahme des BfS zur Langzeitsicherheit  
 Konrad - Casausbreitung im Gebirge

**Seite:**  
 II.

**Stand:**  
 09.03.92

| Rev. | Revisionsst. Datum | verant. Stelle | Gegenzeichn. Name | rev. Seite | Kat. *) | Erläuterung der Revision          |
|------|--------------------|----------------|-------------------|------------|---------|-----------------------------------|
| 01   | 28.04.92           | ET 2.4         | [REDACTED]        |            | S       | Gesamtüberarbeitung der Unterlage |

\*) Kategorie R = redaktionelle Korrektur  
 Kategorie V = verdeutlichende Verbesserung  
 Kategorie S = substantielle Änderung  
 Mindestens bei der Kategorie S müssen Erläuterungen angegeben werden.

Stellungnahme des BfS zur Langzeitsicherheit Konrad - Gasausbreitung im Gebirge

- Bezug: 1. Schreiben des NMU 405d-40326/03-2/1,-17/7 vom 10.12.1991  
2. Schreiben des TÜV Hannover KTSP- /Lk GK-100.01.1, GK-100.02.6 vom 25.11.1991

Im folgenden wird auf die im TÜV-Schreiben angesprochenen Themen eingegangen.

## 1. Rechencode ECLIPSE 100

### 1.1 Begründung des verwendeten Rechencodes

Die verwendeten Gleichungen zur Beschreibung des Zwei-Phasenflusses, die Zustandsgleichungen und die eingesetzten numerischen Algorithmen und Näherungen für deren Lösung entsprechen dem Stand von Wissenschaft und Technik für die Simulation von Gas- und Ölreservoirien. Dies trifft im speziellen auf die zur Anwendung gelangte Methode der Finiten Differenzen in Verbindung mit einem voll-impliziten Lösungsalgorithmus und der Linearisierung der nichtlinearen Terme der partiellen Differentialgleichung mit Hilfe eines iterativen Newton-Raphson-Verfahrens zu. Neben den in der EU 321 angegebenen Literaturhinweisen siehe auch:

Appleyard, J., Cheshire, I.M.: Reservoir Modelling: Fully Implicit Simulation Methods. In: Fayers, J. (Hrsg.): Enhances Oil Recovery. Elsevier Publishing

Appleyard, J., Cheshire, I.M.: Nested Factorisation. Reservoir Simulation Symposium, SPE 12264, 1983

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

### 1.2 Stand der Qualifizierung des Codes

Als kommerziell vertriebenes und eingesetztes Programm verfügt ECLIPSE über eine hochstehende Benutzeroberfläche und ein umfassendes Paket für die Datenverarbeitung in der Pre- und Postprocessingphase sowie für graphische Darstellungen. In einem Vergleich von verschiedenen kommerziellen und öffentlich zugänglichen Computerprogrammen durch Worgan et al. (1990) wurde ECLIPSE als eines jener Programme bezeichnet, die am besten für die

Modellierung der Gasausbreitung in porösen und geklüfteten Medien geeignet sind. ECLIPSE wird weltweit von der Öl- und Gasindustrie für Reservoirsimulationen eingesetzt. In weiteren Anwendungen wurden der Einfluß des Schwellendruckes auf den Abfluß von Gas aus einem nuklearen Endlager in geschichtetes Salz (Davies, 1991) und die Wirksamkeit verschiedener Endlagerauslegungen für schwachaktive Abfälle (Intera, 1989) untersucht.

#### Literaturhinweise:

Davies, P.B.: Evaluation of the Role of Threshold Pressure in Controlling Flow of Waste-Generated Gas into Bedded Salt at the Waste Isolation Pilot Plant. SAND90-3246 UC-721, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 1991

Intera: Comparison of Unsaturated Flow and Transport Models with Volume and Nitrate Measurements from a Pilot-Scale, In-Situ Lysimeter with Different Geometry Low Level Radioactive Waste Designs. Prepared for E.I. du Pont de Nemours & Company, Savannah River Laboratory, Aiken, South Carolina, 1989

Worgan, K.J., Pearson, J. Numez-McNally, T.: A Review of Modelling of Gas Migration in Porous and Fractured Rock. Department of the Environment Commissioned Research on Radioactive Waste Management 1988/89, DOE/RW/89/101, 1990

## 2. Randbedingungen der Analyse

### 2.1 Begründung, experimentelle Absicherung, Bandbreiten der verwendeten Schlüsselparameter

#### 2.1.1 Relative Permeabilität und Kapillardruck

Die relativen Permeabilitäten und Kapillardrücke wurden nach Brooks und Corey parametrisiert. Diese häufig verwendete und akzeptierte Parametrisierung stützt sich auf vier unabhängige Parameter (vgl. Bericht XXXXXXXXXX: Schachanlage Konrad, Salzgitter, Modellrechnungen zur Gasausbreitung im Gebirge vom 29.11.1989, EU 321):

|           |  |
|-----------|--|
| $s_{wr}$  | irreduzible Wassersättigung  |
| $s_{gr}$  | kritische Gassättigung   |
| $\lambda$ | Index der Porengrößenverteilung (pore size distribution index)                 |
| $P_b$     | Schwellendruck (air entry pressure), Kapillardruck bei "geringer Gassättigung" |

Standortspezifische Daten für diese Parameter liegen für Konrad nicht vor, so daß als Modellparameter Literaturdaten für Sedimente mit möglichst ähnlichem Zweiphasenverhalten gewählt wurden. Für den als wichtigste Größe betrachteten Parameter, den Schwellendruck, wurde die Bedeutung des Parameters mit einer Parametervariation untersucht.

Die physikalische Bedeutung von  $s_{wr}$  ist in EU 321 diskutiert. Der Parameter variiert für verschiedene Gesteine typischerweise im Bereich zwischen 0,05 und 0,5. Da die Wassersättigung im Modell durchweg relativ hoch bleibt, ist ein Einfluß dieses Parameters nicht zu erwarten.

Die physikalische Bedeutung von  $s_{gr}$  ist ebenfalls in EU 321 diskutiert. Zur Größe dieses Parameters in porösen Medien gibt es nur wenig Daten in der Literatur. Schätzwerte für seinen typischen Variationsbereich für verschiedene Gesteine sind 0,01 bis 0,1.

Kapillardruckwerte und -kurven für verschiedene Gesteine sind in folgenden Arbeiten aufgeführt:

Brooks, R.H., Corey A.T.: Properties of Porous Media Affecting Fluid Flow. Proc. Soc. Civil Eng., Irrigation and Drainage Div., 1966, S. 61

Carsel, R.F., Parrish, R.S.: Developing Joint Probability Distributions of Soil-Water Retention Characteristics, Water Resources Res. 24(1988), 755-769

King, L.G.: Description of Soil Characteristics for Partially Saturated Flow. Soil Sci. Soc. Am. Proc. 29, 359, 1965

Rawls, W.J., Brankensiek, D.L.: Prediction of Soil Water Properties for Hydrologic Modelling. In: Proc. Symp. on Watershed Management, S. 293-299, American Society of Civil Engineers, Denver, CO, 1985

Typische Kapillardruckkurven für verschiedene Sedimente sind in EU 321 dargestellt.

Der Parameter  $\lambda$  beschreibt die Größenverteilung der Fließöffnungen, wobei ein kleiner Wert sehr feinen Poren und einer breiten Verteilung (d.h. sehr unterschiedlichen Größen der Öffnungen) entspricht, während ein großer Wert eine homogenere Größenverteilung (d.h. eine ähnliche Größe aller Öffnungen) bezeichnet. Dieser Parameter bestimmt die Abhängigkeit des Kapillardrucks und der relativen Permeabilität für Wasser von der effektiven Wassersättigung. Typischerweise kann  $\lambda$  zwischen 0,1 und 4,0 variieren. Die Parametrisierung von Corey unterscheidet sich von jener nach Brooks und Corey durch einen festen Wert von  $\lambda = 2,0$ .

Der Parameter  $P_b$  bezeichnet den Schwellendruck und entspricht dem Kapillardruck bei extrem geringer Gassättigung. Während die in EU 321 verwendete Literatur typische Werte im Bereich von 1 kPa bis einige 10 kPa angibt, nennen andere Arbeiten höhere Werte im Bereich von 100 kPa bis 1000 kPa. In einem neuen Bericht von Davies (1991, siehe 1.2) wurde aus einer großen Zahl von Felddaten eine Korrelation zwischen  $P_b$  und der hydraulischen Permeabilität  $k$  hergeleitet

$$P_b \text{ [MPa]} = 5,6 \cdot 10^{-7} (k[m^2])^{-0,346},$$

die ein 95%-Vertrauensintervall von  $\pm$  einer halben Größenordnung aufweist. Diese Korrelation ergibt für das Oxford einen Schwellendruck von ca. 100 kPa.

Die Modellrechnungen zeigen, daß der Anstieg des Wasserdrucks innerhalb des Endlagers als Folge der Gasproduktion hauptsächlich durch die Gasproduktionsrate und die Permeabilität (und damit die gesättigte hydraulische Konduktivität) des Wirtsgesteins bestimmt wird. Demgegenüber ist der Anstieg des Gasdrucks zusätzlich auch stark vom Schwellendruck abhängig. Die übrigen Zweiphasen-Parameter dürften vor allem die zeitliche Entwicklung des Systems und das kleinräumige Fließfeld bestimmen und auf den Anstieg des Wasserdrucks und das großräumige Fließfeld nur einen geringen Einfluß haben.

Der Einfluß von  $P_b$  wurde mit einer Parametervariation untersucht. In einem speziellen Rechenfall wurde der Schwellendruck des Wirtsgesteins von 5 kPa auf 15 kPa erhöht. Dies bewirkte einen Anstieg des Gasdrucks um ungefähr die gleiche Druckdifferenz, was bedeutet, daß der Wasserdruck in der Umgebung des Endlagers im wesentlichen unverändert blieb.

### 2.1.2 Porosität

Gemessene Porositätswerte liegen für Oxford und Kimmeridge vor. Die gemessenen Porositätswerte des Oxford streuen innerhalb eines Intervalls von 0,1 % bis 27 % (vergl. Diskussion in Colenco: Schachtanlage Konrad, Salzgitter, Einfluß der bestehenden Tiefbohrungen und des Schachtverschlusses, Modellierung der Radionuklidenausbreitung, 11.1.1990, EU 339).

Die gemessenen Porositätswerte des Kimmeridge liegen innerhalb eines Intervalls von 0,8 % bis 23 % (Literaturhinweis wie oben).

Für die hydraulische Einheit Grubengebäude liegen keine Meßwerte zur Porosität vor. Solche wären auch schwierig zu ermitteln, denn diese Einheit beschreibt als homogenes Medium die räumlich gemittelten Eigenschaften sowohl des Wirtsgesteins im Endlagerbereich als auch dessen aufgelockerte Bereiche, des Abfalls und des Verfüllmaterials.

Die gewählten Modellparameter von 10 % für jede der drei hydraulischen Einheiten Grubengebäude, Oxford und Kimmeridge entsprechen den Parameterwerten, die für die kommunizierende Porosität bei der Simulation der Radionuklidenausbreitung verwendet wurden.

Die Werte der Porosität bestimmen hauptsächlich den zeitlichen Ablauf der Gasfreisetzung, wobei große Porositätswerte eine langsame Entwicklung des Systems bewirken. Der Einfluß auf die Fließprozesse wurde mit der Parametervariation "duale Porosität" (siehe EU 321) untersucht. Sie zeigte keine relevanten Unterschiede zum Referenzfall.

## 2.2 Einfluß der Modell-Diskretisierung

### 2.2.1 Einleitung

Zur Untersuchung des Einflusses der Modelldiskretisierung sind zusätzlich zu den Rechnungen in EU 321 neue Modellrechnungen durchgeführt worden. Die Zielsetzung dieser Modellrechnungen lautet:

- den Referenzfall der Modellrechnungen XXXXXXXXXX vom November 1989 (EU 321), die mit dem Code ECLIPSE durchgeführt worden sind, mit einem zweiten Code (TOUGH2) nachzurechnen,
- mit einem zweiten Rechenfall den Einfluß der Diskretisierung zu überprüfen.

In einem ersten Lauf wurde deshalb das konzeptuelle Modell (Modellgeometrie, Diskretisierung, Parameter, Randbedingungen), das die Modellrechnungen in EU 321 charakterisiert, so genau als möglich in ein Modell, das durch TOUGH2 berechnet werden kann, umgesetzt und berechnet.

In einem zweiten Lauf wurde anschließend das Elementnetz in der Mitte des Grubengebäudes verfeinert. Dies erfolgte, indem dort die gleiche Sequenz von Elementgrößen eingeführt wurde, die auch

an den beiden Enden des Grubengebäudes, wo nach den Berechnungen in EU 321 ausschließlich Gas freigesetzt wird, verwendet wird.

Die beiden Elementnetze werden mit "grobes Mesh" und "feines Mesh" bezeichnet und sind in Abb. 1 bzw. Abb. 2 dargestellt.

Beim Nachvollzug der ECLIPSE-Simulationen (EU 321) mit dem Code TOUGH2 ergaben sich folgende, nicht eliminierbare Unterschiede:

- ECLIPSE ist in der Lage folgende Randbedingung zu verarbeiten: Der Modellrand ist ein Fest-Druck-Rand, solange Wasser oder Gas in das Modellgebiet zufließt, und ein geschlossener Rand, falls Wasser oder Gas aus dem Modell abfließen möchte. Diese Option ist in TOUGH2 nicht vorgesehen. Gestützt auf die Ergebnisse von ECLIPSE wurde als Randbedingung für TOUGH2 der linke (südliche) Modellrand als undurchlässig angenommen.
- ECLIPSE setzt bei vollständiger Wassersättigung nichtverschwindende Kapillardrücke an. Demgegenüber verwendet TOUGH2 eine Parametrisierung des Kapillardrucks mit verschwindendem Kapillardruck bei vollständiger Wassersättigung und raschem Anstieg auf den vorgegebenen Endwert.
- Die Funktion zur Beschreibung der Dichte des Wassers hängt in beiden Codes nicht exakt in der gleichen Weise von den Parametern Temperatur, Druck und Gassättigung ab.

Die Durchführung der Modellrechnungen hat gezeigt, daß das Modell für TOUGH2 numerisch äußerst diffizil ist. Dies äußerte sich darin, daß das Modell mit undurchlässigem oberem Rand nur bis etwa 200 Jahre berechnet werden kann und das Programm nach dieser Zeit numerisch versagt. Innerhalb dieser Zeit liegen jedoch das Maximum des Druckanstiegs im Grubengebäude und der anschließende geringe Druckabfall (siehe Abb. 3), wie er auch von ECLIPSE berechnet wurde (siehe EU 321). Läufe mit undurchlässigem oberem Modellrand und berechneter Modellzeit bis etwas über 200 Jahre wurden verwendet, um den Druckanstieg zu überprüfen.

Läufe mit unveränderter Modellgeometrie aber substantiell erhöhten Volumina der Elemente in der obersten Elementreihe wurden verwendet, um die Gasverteilung in der Umgebung des Grubengebäudes zu überprüfen. Es bedurfte dieser Anhebung der Elementvolumina, um das Modell numerisch genügend stabil zu machen, damit Zeiten über 200 Jahre hinaus berechnet werden konnten. Die größere Pufferkapazität der obersten Modellreihe bewirkt, daß der obere Modellrand sowohl für Gas als auch für Wasser weitgehend durchlässig modelliert wird. Damit kann allerdings weder der Druckanstieg noch die Akkumulation von Gas an der Modellobergrenze nachvollzogen werden.

### 2.2.2 Resultate

Nach den TOUGH2-Rechnungen beginnt die Gasfreisetzung nach rund 120 Jahren, also etwas früher als mit ECLIPSE berechnet (vergl. EU 321). Dies könnte durch die leicht unterschiedliche Parametrisierung des Kapillardrucks bei extrem geringer Gassättigung verursacht werden. Nach 158 Jahren, also zum Zeitpunkt der Gasfreisetzung nach ECLIPSE, beträgt sie im ersten, nur 0,1 m mächtigen Oxford-Element über dem Grubengebäude lediglich 1%, während sie im darunterliegenden obersten Grubenelement 63,5% beträgt. Auch bei den TOUGH2-Läufen beginnt die Gasfreisetzung substantiell also erst zu diesem Zeitpunkt.

Der maximale Anstieg des Gasdrucks im Grubengebäude wird im Zeitschritt 158 a erreicht (siehe Abb. 3) und beträgt 0,32 bar. Demgegenüber betrug der maximale Druckanstieg nach ECLIPSE 0,26 bar (siehe EU 321). Es ist allerdings zu beachten, daß wegen der unterschiedlichen Parametrisierung des Kapillardrucks diese beiden Werte nicht unmittelbar vergleichbar sind. In ECLIPSE ist der Gasdruck bereits zu Beginn gegenüber dem Wasserdruck um den Kapillardruck (d.h. um 0,015 bar) erhöht, während bei TOUGH2 Wasser- und Gasdruck identisch sind. Mit der Definition des Gasdruckanstiegs von ECLIPSE ( $\Delta P_g = 0,26$  bar) liefert TOUGH2 einen Gasdruckanstieg von  $\Delta P_g = 0,305$  bar. Diese Übereinstimmung wird als gut beurteilt.

Die Entwicklung des Druckanstiegs mit der Zeit nach TOUGH2 ist in Abb. 3 dargestellt. Sie stimmt mit der Abb. 4-5 der EU 321 gut überein und zeigt ebenfalls den leichten Druckabfall nach Einsetzen der Gasfreisetzung. Eine Folge der unterschiedlichen Parametrisierung des Kapillardrucks ist allerdings, daß für Zeiten vor 158 a der Gasdruck im Grubengebäude etwas größer ist als im darüberliegenden Oxford.

Ein Vergleich der räumlichen Verteilung der Gasfreisetzung zeigt für beide Elementnetze sehr ähnliche Verteilungen (siehe Abb. 4 bis Abb. 6 bzw. Abb. 7 bis Abb. 9). Insbesondere bildet sich bei der feineren Diskretisierung keine zusätzliche Freisetzungsfahne in der Mitte des Grubengebäudes. Daraus kann geschlossen werden, daß die lokale Freisetzung an den Enden des Grubengebäudes kein Effekt der Diskretisierung ist.

Der Vergleich zwischen den Ergebnissen für die Gasverteilung von ECLIPSE und von TOUGH2 zeigt qualitativ das gleiche Ergebnis. Unterschiede bestehen darin, daß nach TOUGH2 die Gasfahne auf der Zustromseite nur geringfügig kleiner ist als jene auf der Abstromseite, und daß auch zwischen den beiden dominanten Gasfahnen eine geringe Gasfreisetzung über die Obergrenze des Grubengebäudes erfolgt. Wie bereits geschildert, konnte die Akkumulation von Gas an der Modellobergrenze aufgrund numerischer Probleme nicht simuliert werden.

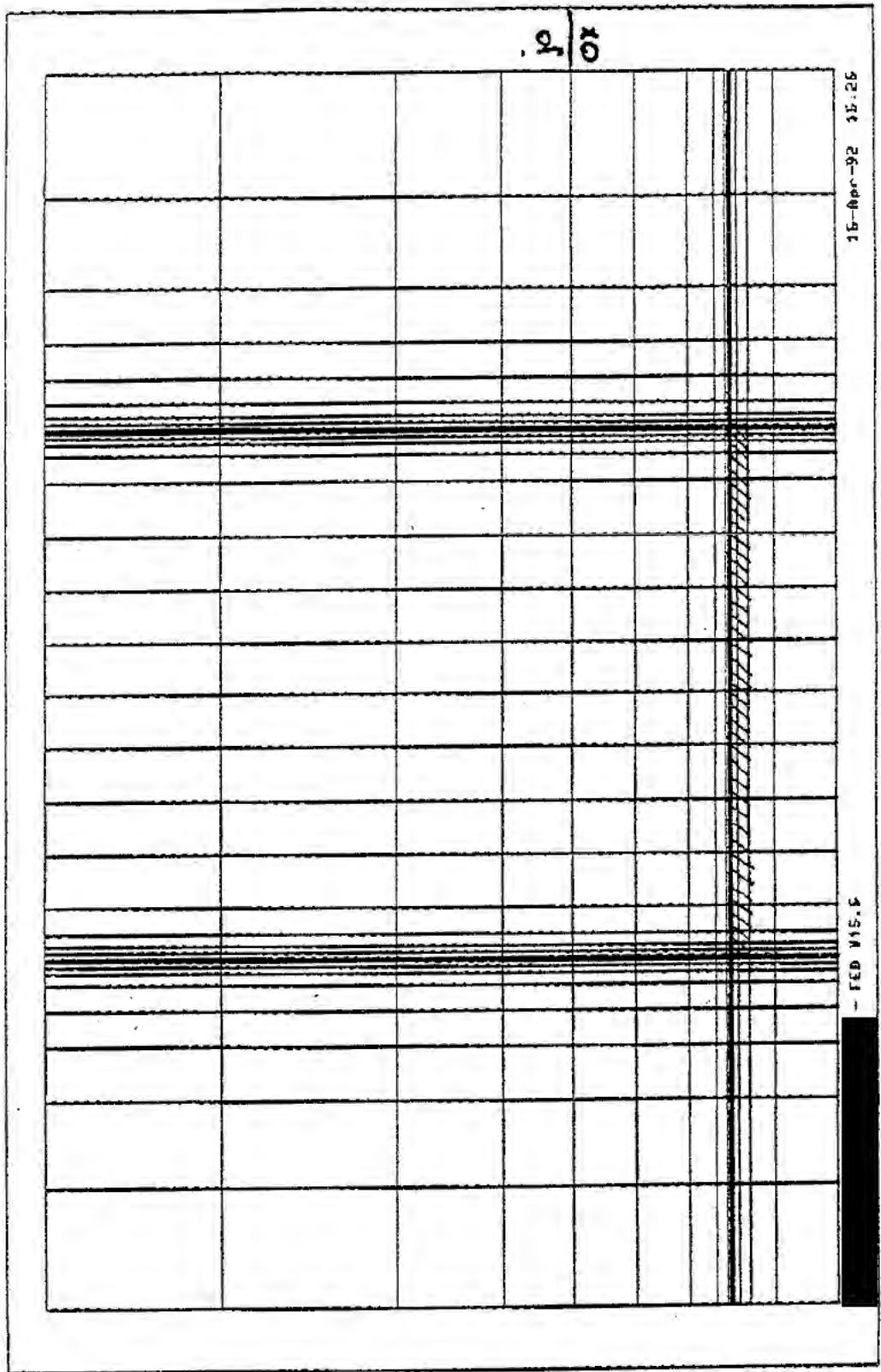
### 2.2.3 Schlußfolgerungen

Die Modellrechnungen mit TOUGH2

- bestätigen den von ECLIPSE berechneten Druckanstieg quantitativ,
- bestätigen die von ECLIPSE berechnete Ausbreitung des Gases qualitativ,
- zeigen, daß die von ECLIPSE berechnete lokale Freisetzung kein Effekt der Diskretisierung ist,

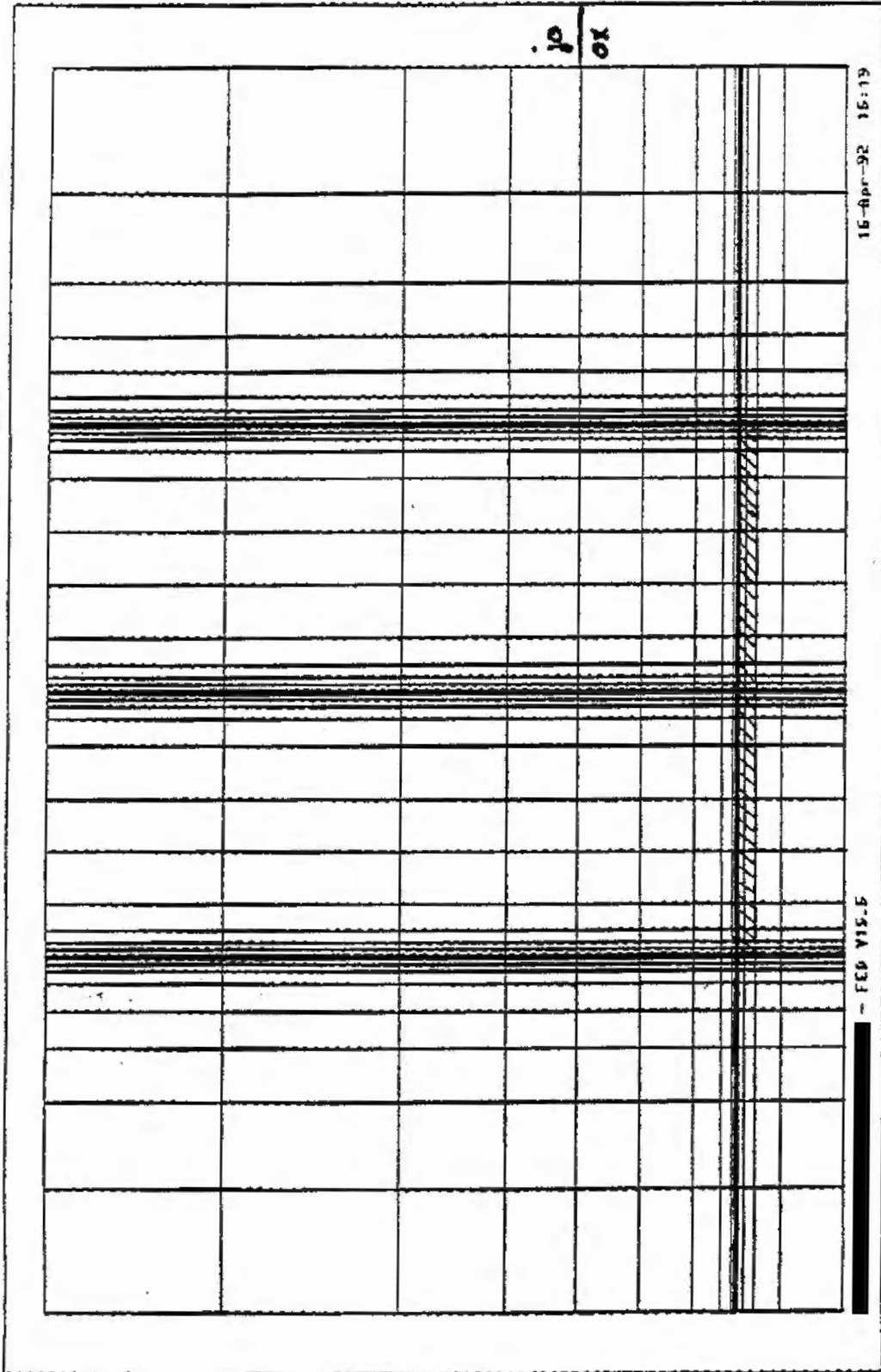
und bestätigen damit die in EU 321 getroffenen Aussagen.

Abb. 1: Grobes Mesh, 5-fach ueberhoecht



11111 - Gantle

Abb. 2: Feines Mesh, 5-fach ueberhoeht



SENDER: +4156837357

1992-04-16 17:28 63-96 S

#8

Abb.3:

$\times 10^7$  Gasdruck im Endlager und im Oxford in der oberen Endlagerecke auf der Abstromseite als Funktion der Zeit

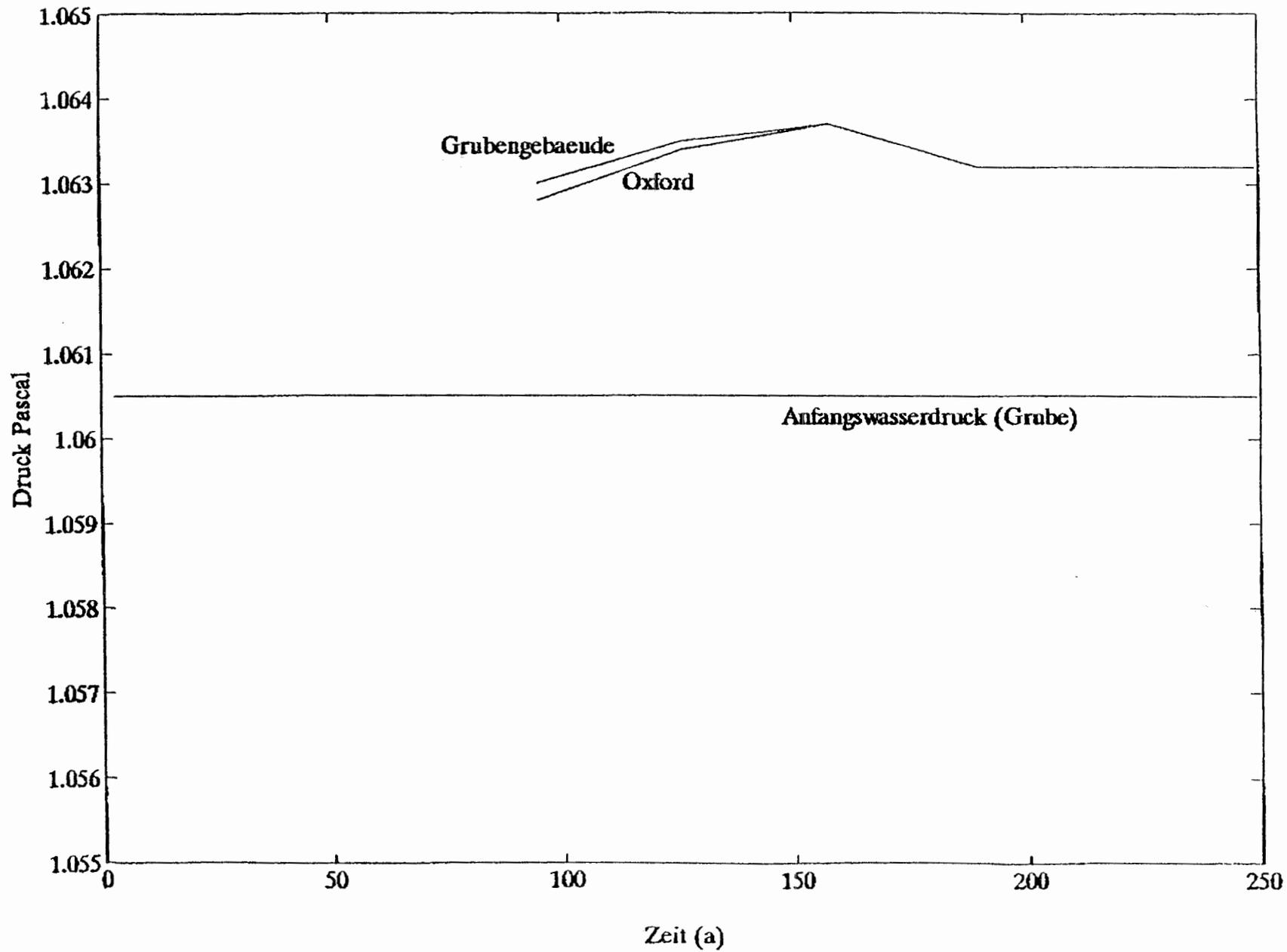
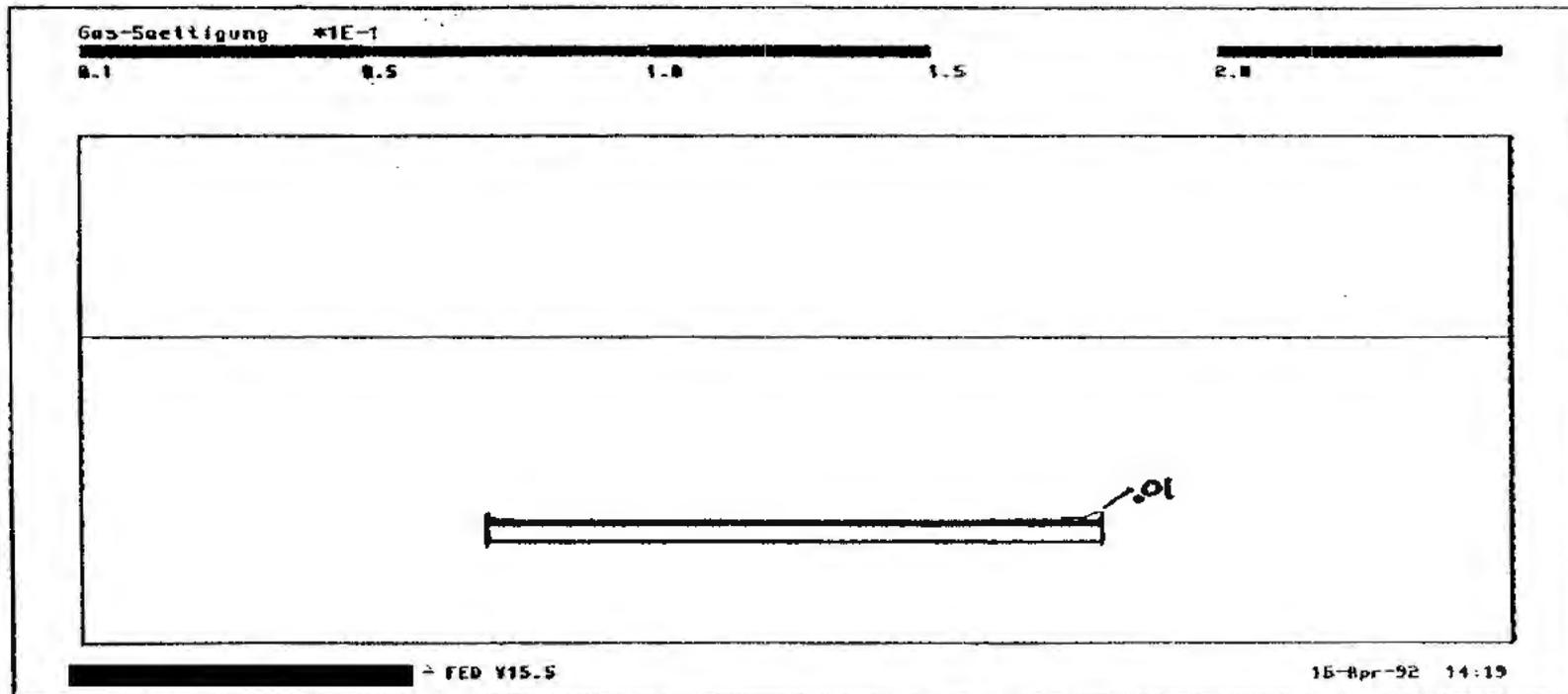
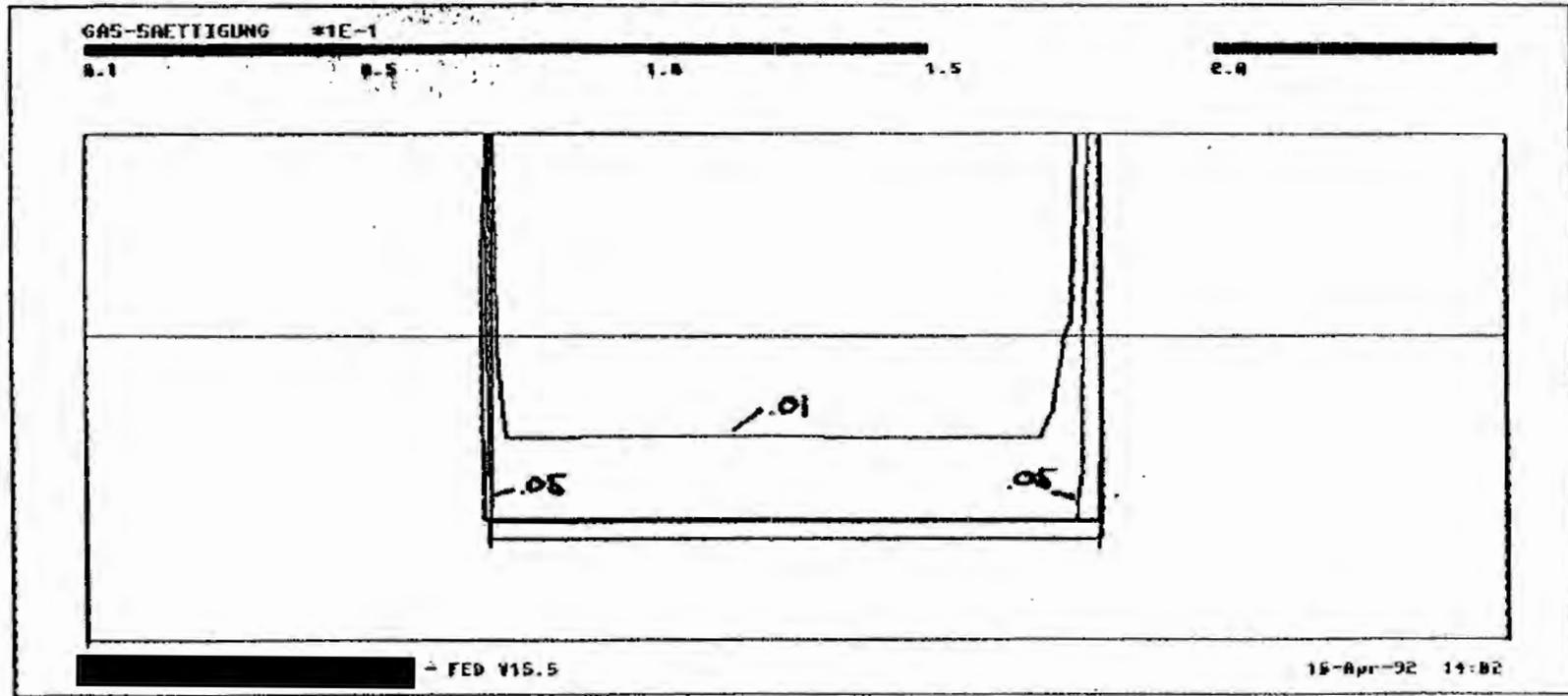


Abb. 4: Gassoettigung im groben Mesh zur Zeit  $t=1900$



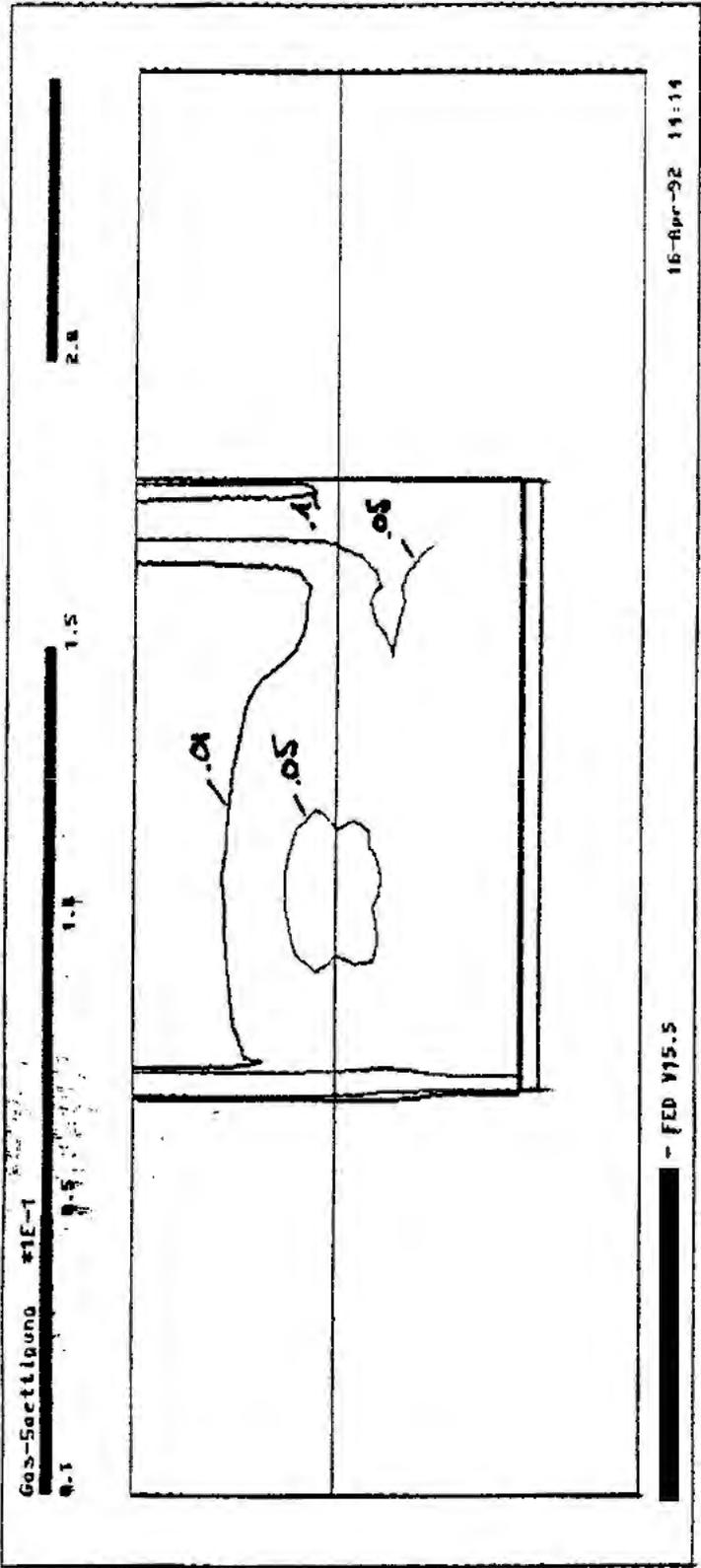
5fache Ueberhoehung des Elementnetzes

Abb. 5: Gassättigung im groben Mesh zur Zeit  $t=1000\alpha$



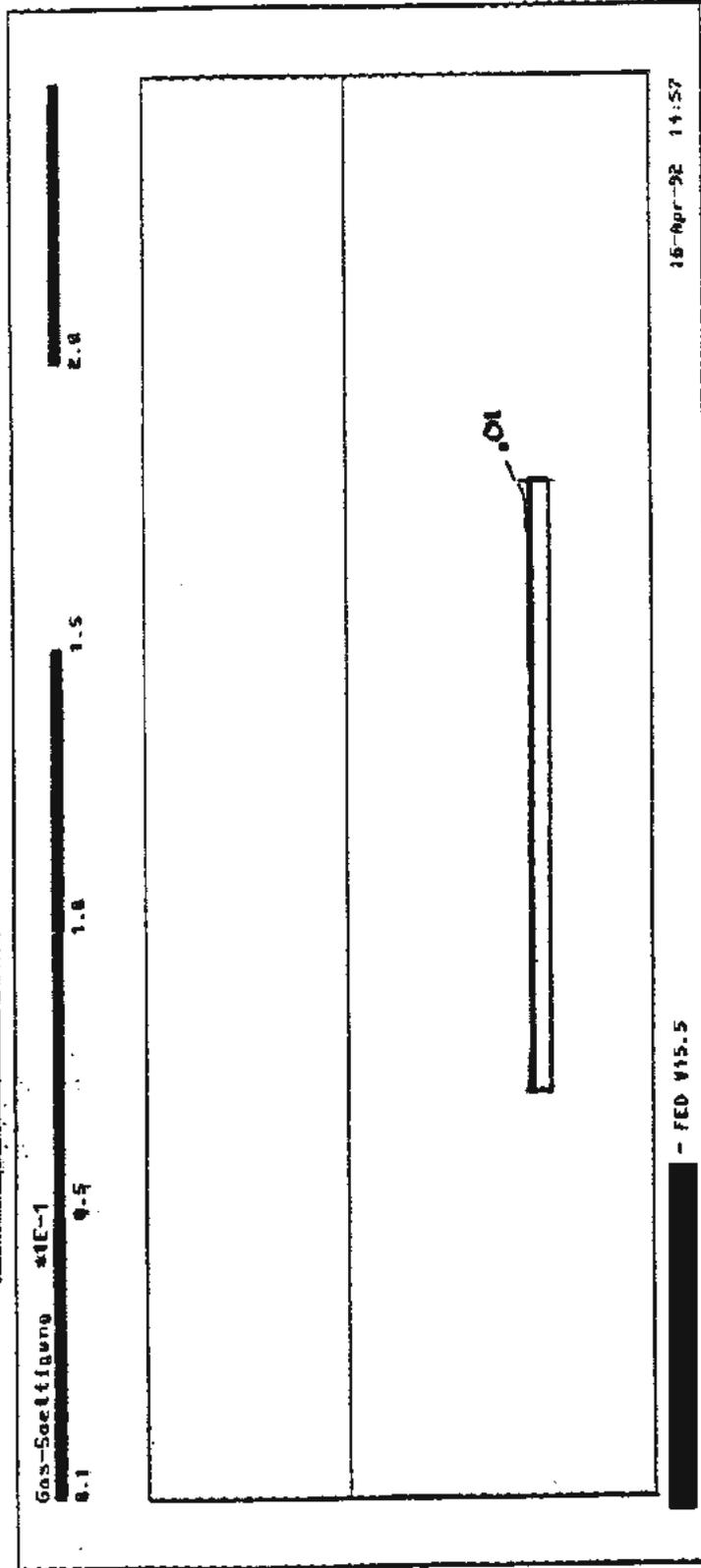
5fache Überhöhung des Elementnetzes

Abb. 6: Gassättigung im groben Mesh zur Zeit  $t=5000a$



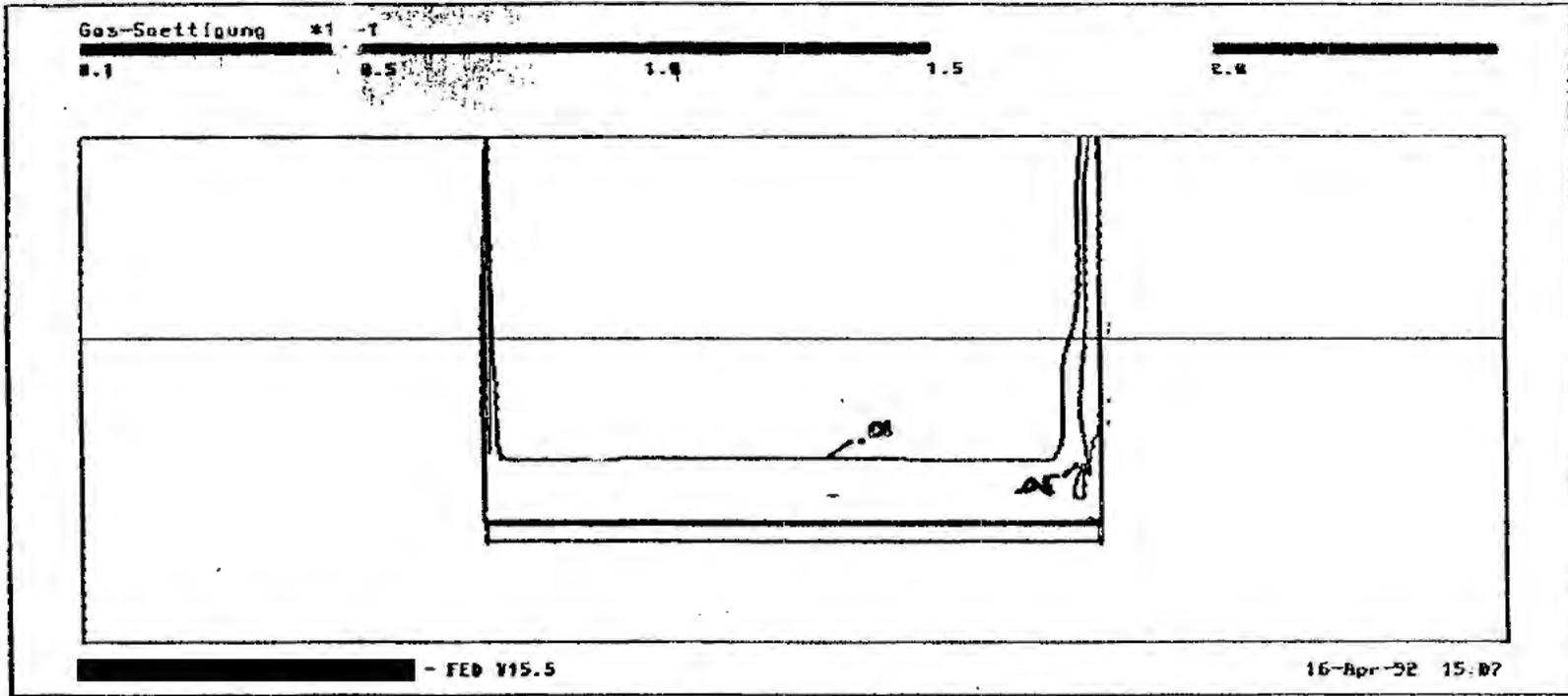
5fache Verberhöhung des Elementnetzes

Abb. 7: Gassättigung im feinen Mesh zur Zeit  $t=190a$



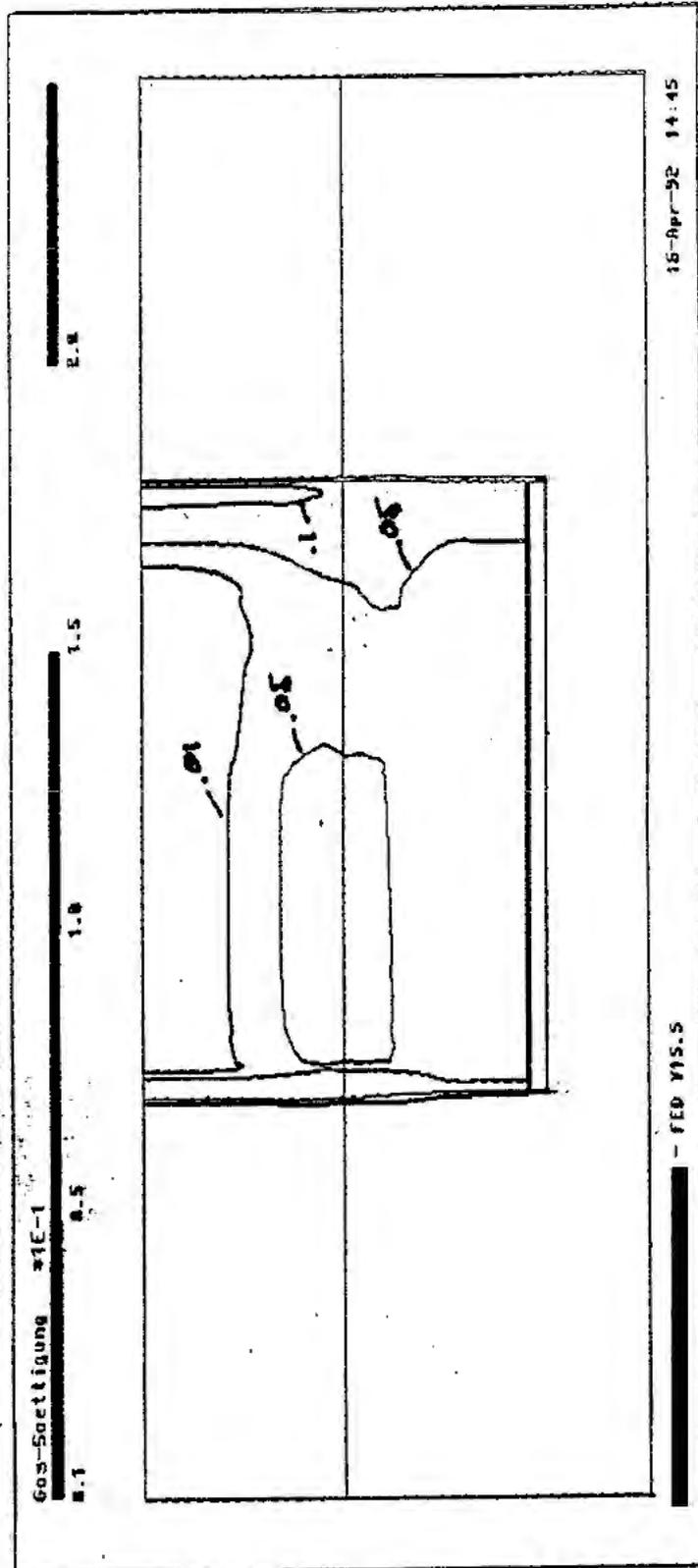
Sfache Überhöhung des Elementnetzes

Abb. 8: Gassaettigung im feinen Mesh zur Zeit  $t=1000a$



5fache Ueberhöhung des Elementnetzes

Abb. 9: Gossättigung im feinen Mesh zur Zeit  $t=5000a$



5fache Überhöhung des Elementnetzes