



Entwicklung und Verifizierung von Rechenprogrammen zur Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen

Abschlussbericht zum Forschungsprojekt ERLa
FKZ 4722B10205

Jens Eckel, Gerd Frieling,
Stephan Hotzel, Martin Navarro,
Carsten Rücker, Torben Weyand



Entwicklung und Verifizierung von Rechenprogrammen zur Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen

Dieser Bericht stellt ein Ergebnis wissenschaftlicher Forschung des BASE zum Zeitpunkt der Veröffentlichung dar und entfaltet keine Bindungswirkung für das künftige Handeln des BASE, insbesondere nicht für Entscheidungen im Rahmen von Genehmigungs-, Aufsichts- oder Beteiligungsverfahren.

BASE-015/25

Bitte beziehen Sie sich beim Zitieren dieses Dokumentes immer auf folgende URN:
urn:nbn:de:0221-2026070261055

Köln, Januar 2026

Impressum

**Bundesamt
für die Sicherheit
der nuklearen Entsorgung
(BASE)**

BASE – INHOUSE - FORSCHUNGSBERICHTE ZUR
SICHERHEIT DER NUKLEAREN ENTSORGUNG

Jens Eckel, Gerd Frieling, Stephan Hotzel, Martin Navarro, Carsten Rücker, Torben Weyand

030 184321-0
www.base.bund.de

Stand: Januar 2026

GZ: F4-BASE-BASE62140/02

Entwicklung und Verifizierung von Rechenprogrammen zur Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen

Abschlussbericht zum Forschungsprojekt ERLa

**Jens Eckel
Gerd Frieling
Stephan Hotzel
Martin Navarro
Carsten Rücker
Torben Weyand**

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Strategieentwicklung	3
2.1	Einsatzbereich der Rechenprogramme	4
2.1.1	Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung	4
2.1.2	Forschung	9
2.2	Anforderungen an die Rechenprogramme	10
2.2.1	Allgemeine Anforderungen	10
2.2.2	Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“	11
2.2.3	Einsatzbereich „Forschung“	12
2.3	Qualitätssicherungsmaßnahmen	13
2.3.1	Entwicklungsplanung	14
2.3.2	Verifizierung des Rechenprogramms	15
2.3.3	Validierung der Rechenprogramme	16
2.3.4	Dokumentation des Rechenprogramms	18
2.3.5	Ergänzende Maßnahmen	19
3	Softwareplanung	21
3.1	Rechenprogramme	21
3.2	Vergleich PFLOTRAN/TOUGH	25
3.2.1	Allgemeine Leistungsmerkmale	25
3.2.2	Spezifische Leistungsmerkmale	26
3.2.3	Modelle in TOUGH2-GRS	29
3.2.4	Vergleich sonstiger Merkmale	31
3.2.5	Schlussfolgerung	33
3.3	Potential FEHM	33
3.4	Festlegung zur künftigen Weiterentwicklung	34
4	Weiterentwicklung von Rechenprogrammen	37
4.1	PFLOTRAN: Anisotrope Tortuositäten für diffusiven Transport	37
4.2	MARNIE2: Lineare relative Permeabilitäten	40
5	Verifizierung von Rechenprogrammen	43
5.1	Verifizierung für Radionuklidtransport mit Adsorption	43
5.2	Spezifischer Vergleich TOUGH3/PFLOTRAN: Testfall SAMR1	45
5.2.1	Testfälle für PFLOTRAN und FEHM	49

5.3	Verifizierung HM Kopplung	51
5.3.1	Arbeiten zu PFLOTRAN	52
5.3.2	Arbeiten zu FEHM	53
5.4	Automatisierte Regressionstests für MARNIE2	58
6	Pre- und Postprocessing	61
6.1	Verwendete Programme im Workflow	61
6.1.1	SALOME	61
6.1.2	SALOME-PFLOTRAN-Interface	62
6.1.3	ParaView	63
6.1.4	Gmsh	63
6.1.5	Toughio	63
6.2	Preprocessing	64
6.3	Anforderungen an das Modellgitterformat	65
6.4	Erstellen eines Modellgitters mit der SALOME-GUI über das Mesh Modul	68
6.4.1	Mesh-Methode 1: Hexahedron (i,j,k)	70
6.4.2	Mesh-Methode 2: Body-Fitting	72
6.4.3	Erstellen der Randbedingung	73
6.4.4	Anmerkungen	74
6.4.5	Export der Modellgitter für TOUGH2 und PFLOTRAN	75
6.5	Postprocessing	76
6.5.1	Postprocessing für PFLOTRAN	76
6.5.2	Postprocessing für TOUGH2-GRS	78
6.6	Ausblick	79
7	Validierung des Pre- und Postprocessing-Workflows	81
7.1	Allgemeine Modellannahmen	82
7.2	Modellgitter	84
7.3	Annahmen für die Zweiphasenflussmodelle	86
7.4	Unterschiede in den Simulationsprogrammen	90
7.5	Ergebnisse des linearen Kapillardruckmodells	92
7.5.1	Kontinuum Plots	93
7.5.2	Zeitliche Entwicklung Fluiddruck vs. Flüssigkeitssättigung . . .	94
7.5.3	Zeitliche Entwicklung Kapillardruck vs. Flüssigkeitssättigung .	96
7.6	Variation der Zweiphasenflussansätze	97
7.7	Vergleich Modellgittervariante-A und Variante-B	99
7.8	Resümee und Zusammenfassung	102

8 Geochemische Modellierungen im Rahmen des Mont Terri BN-Experimentes	103
8.1 Zielstellung	103
8.2 Projektverlauf	104
8.3 Zusammenfassung und Ausblick	107
9 Indikatoren zu Einschluss und Isolation der wesentlichen Barrieren	109
9.1 Bestimmung der Radionuklidmengen	110
9.1.1 Datengrundlage Inventar	110
9.1.2 Methodik Berechnung Radionuklidaktivitäten	112
9.1.3 Auswahlkriterien Radionuklide	118
9.1.4 Ergebnis Radionuklidmengen	122
9.2 Vergleich des Inventars zwischen MARNIE und PFLOTRAN	125
Literatur	127
A Anhang	137
A.1 Anwendung der Radionuklidauswahlkriterien	137
A.2 Inventarvergleich MARNIE/PFLOTRAN	149
A.3 Wissenschaftliche Beiträge	154

1 Einleitung

Die regulatorische Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen im Standortauswahlverfahren und die Bewertung von Fragestellungen im Zusammenhang mit Endlagersystemen außerhalb des Standortauswahlverfahrens erfordert diversifizierte, hochspezialisierte, langlebige und qualitätsgesicherte Rechenprogramme. Die Eigenentwicklung von Rechenprogrammen bzw. Weiterentwicklung von Open-Source-Programmen und deren Verifizierung erlauben eine hohe Flexibilität der Modellbildung für regulatorische Fragestellungen sowie ein vertieftes Verständnis der Rechenprogramme und Prozesse. Die Entwicklung der Rechenprogramme ist ein kontinuierlicher Prozess, der frühzeitig begonnen werden muss, damit die Programme, wenn sie zum Einsatz kommen sollen, in qualitätsgesicherter und verifizierter Form vorliegen.

Dazu wurde in der Forschungsabteilung des Bundesamts für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (BASE) im Zeitraum 01.01.2022 bis 31.12.2025 das Inhouse-Forschungsprojekt *Entwicklung und Verifizierung von Rechenprogrammen zur Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen* (ERLa) durchgeführt. Die durchgeführten Forschungs- und Entwicklungsarbeiten fanden vor dem Hintergrund statt, dass die im Projekt Mitarbeitenden im Jahr 2021 von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) zum BASE gewechselt sind. Die GRS hat als Gutachterorganisation das BMUKN über Jahrzehnte in Fragen der Entsorgung radioaktiver Abfälle beraten und dazu auch Entwicklung und Verifizierung von Rechenprogrammen betrieben. Die Verlagerung dieser Beratungsaufgaben und der damit verbundenen Forschungs- und Entwicklungsaufgaben war im Zuge der Neuordnung der Organisationsstrukturen im Bereich der Entsorgung radioaktiver Abfälle durch das Standortauswahlgesetz (StandAG) notwendig geworden.

Die genannten organisatorischen Veränderungen wurden genutzt, um zunächst eine Strategie zur künftigen Weiterentwicklung von Rechenprogrammen am BASE zu entwickeln (Kapitel 2). Hier wird zwischen den Einsatzgebieten *Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung* und *Forschung* unterschieden, und es werden spezifische Rahmenbedingungen und Qualitätssicherungsmerkmale erarbeitet, die sich aus den gängigen Normen zur Entwicklung von Rechenprogrammen ergeben. Im Kapitel 3 werden, unterstützt durch einen Vergleich des Potentials der Rechenprogramme PFLOTRAN und TOUGH2-GRS, Festlegungen getroffen, welche Rechenprogramme zukünftig in der Forschungsabteilung des BASE prioritär weiterentwickelt werden.

Im Kapitel 4 werden verschiedene Weiterentwicklungen der Rechenprogramme

PFLOTRAN und MARNIE2 sowie zugehörige Verifikationsfälle dokumentiert. Das daran anschließende Kapitel 5 beschreibt verschiedene Arbeiten zur Verifizierung von Rechenprogrammen. Hier stehen nicht Arbeiten im Vordergrund, die der Verifizierung von Entwicklungsarbeiten dienen, sondern es werden eigene Arbeiten zur Verifizierung der am BASE zukünftig genutzten und weiterzuentwickelnden Rechenprogramme dokumentiert.

An die Rechenprogramme, die in der regulatorischen Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen eingesetzt werden, werden in Bezug auf Pre- und Postprocessing besondere Anforderungen gestellt. Die Bewertungen können potentiell unter hohem Zeitdruck stattfinden, weshalb ein hoher Automatisierungsgrad bei der Erstellung teils hochkomplexer Rechengitter erstrebenswert ist. Außerdem sollen die Ergebnisse transparent und gut verständlich in der wissenschaftlichen und nichtwissenschaftlichen Öffentlichkeit dargestellt werden. Dazu wurden Entwicklungsarbeiten durchgeführt, die im Kapitel 6 dargestellt sind.

Über die Verifizierung von Rechenprogrammen hinaus müssen Rechenprogramme einer anwendungsnahen Überprüfung unterzogen werden. Diese Überprüfung ist in dem Sinne zu verstehen, dass ein bestimmtes, für die Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen relevantes Phänomen betrachtet wird. Hierbei ist es entscheidend, dass das Phänomen selber aus mehreren, teils überlagerten Einzelprozessen besteht. So können eventuelle konzeptionelle Schwächen der Rechenprogramme erkannt werden, die in der Verifikation der Programme über Einzelprozesse nicht sichtbar werden. Dazu werden in den Kapiteln 7 bis 9 verschiedene Arbeiten gezeigt. Diese reichen von einem Vergleich der Rechenprogramme PFLOTRAN und TOUGH2-GRS für ein generisches Endlagersystem, wie es im Benchmark DECOVALEX genutzt wird, über geochemische Modellierungen eines Experiments, wo das BASE im Rahmen des Mont Terri Felslabors beteiligt ist, bis hin zu einer aktualisierten Herleitung des zu berücksichtigenden Inventars an Nukliden für ein mögliches Endlager für stark wärmeentwickelnde Abfälle.

ERLa deckt damit ein breites thematisches Spektrum ab und wird im Inhouse-Forschungsprojekt ERLa2 ¹ fortgesetzt.

¹Forschungskennzahl 4726B10201; Laufzeit: 01.04.2026 bis 31.12.2029

2 Strategieentwicklung

Jens Eckel, Stephan Hotzel, Martin Navarro

Im Rahmen des Inhouse-Forschungsprojekts ERLa ist eine Strategie zur Entwicklung des Instrumentariums zur wissenschaftlichen Modellierung im Bereich der Forschung und der Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung im Bereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle entwickelt worden.

Zur Bewertung der Langzeitsicherheit eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und für zahlreiche Fragestellungen der Sicherheit kerntechnischer Anlagen kommen häufig Rechenprogramme zum Einsatz, da viele Fragestellungen in diesem Kontext überhaupt nur mithilfe von Rechenprogrammen zu beantworten sind. Das vorliegende Kapitel beschreibt den Rahmen und die generellen Zielsetzungen für den Aufbau eines Instrumentariums in der Abteilung F für die Forschung und Sicherheitsanalytik zur Langzeitsicherheit eines Endlagers und perspektivisch auch zur Sicherheit kerntechnischer Anlagen. Im weiteren Sinne umfasst das Instrumentarium nicht nur Rechenprogramme, sondern auch deren Anwendungs- und Entwicklungsumgebungen, ferner auch alle Hilfscodes, die für Berechnungen, Datenverarbeitung, Visualisierung und Dokumentation verwendet werden. Für die Simulationscodes werden Haupteinsatzbereiche und für jedes Einsatzbereich spezifische Anforderungen an die Codes und ihre Qualitätssicherung definiert. Dabei werden konkrete Qualitätssicherungsmaßnahmen benannt.

Dieses Kapitel verwendet die Begriffe und orientiert sich an den Konzepten der Normenreihe (*DIN 2015b*; *DIN 2015a*) und (*ISO 2018*). „Qualitätssicherung“ ist dort definiert als „Teil des Qualitätsmanagements, der auf das Erzeugen von Vertrauen darauf gerichtet ist, dass Qualitätsanforderungen erfüllt werden“ (*DIN 2015b*). Das Attribut „qualitätsgesichert“ wird im Folgenden für Produkte des hier beschriebenen Instrumentariums (Rechenprogramme, Hilfscodes, ...) verwendet, die festgelegte Qualitätssicherungsmaßnahmen durchlaufen haben.

Das vorliegende Kapitel ist in erster Linie dazu gedacht, ein gemeinsames Verständnis für Entwicklung und Umgang mit Rechenprogrammen zu finden. Da dieses gemeinsame Verständnis Veränderungen unterliegen kann, sollte das Kapitel im Abstand von zwei Jahren überprüft und gegebenenfalls angepasst werden. Eine Herausforderung für die Entwicklung des sicherheitsanalytischen Instrumentariums in der Abteilung F sind die Randbedingungen für eine Unterstützung der Fachabteilung des BASE bei ihren Aufsichts- bzw. Genehmigungsaufgaben. Dies betrifft u. a.

Inhalt und Umfang einer solchen Unterstützung. Die Weiterentwicklung und Überprüfung sollen deshalb unter Einbeziehung der Bedürfnisse der Fachabteilungen erfolgen. Um flexibel auf zukünftige Entscheidungen des BASE im Rahmen der Sicherheitsanalytik reagieren zu können, wird im Folgenden davon ausgegangen, dass das sicherheitsanalytische Instrumentarium so in der Abteilung F zu entwickeln ist, dass im Sinne einer gründlichen und effizienten Prüfung der Sicherheitsuntersuchungen der Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE) mbH eine umfangreiche Unterstützung der Fachabteilungen des BASE in Bezug auf Expertise, Codes und Rechenleistung möglich wird.

2.1 Einsatzbereich der Rechenprogramme

Rechenprogramme werden i. d. R. für bestimmte Einsatzbereiche entwickelt bzw. angeschafft, können aber auch in mehreren Einsatzbereichen angewendet werden. Anforderungen an die Programme und ihre Qualitätssicherung sind oft vom Einsatzbereich abhängig. Für die vorliegende Planung wird zwischen den Einsatzbereichen „Forschung“ und „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ unterschieden. Unter dem Einsatzbereich „Forschung“ sind sämtliche Rechenprogramme zusammengefasst, die nicht im Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ eingesetzt werden oder nicht mit den für den Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ vorgesehenen Qualitätssicherungs(QS)-Maßnahmen qualifiziert worden sind. Beide Einsatzbereiche besitzen jedoch Überschneidungen, da ein wesentliches Ziel der Forschung am BASE die Unterstützung seiner Aufsichts- und Genehmigungsaufgaben ist. Gleichwohl ist eine Unterscheidung zwischen diesen Einsatzbereichen für die Entwicklung eines Konzepts zielführend.

2.1.1 Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung

Das Einsatzbereich zeichnet sich durch höhere Qualitäts-Anforderungen und stärker geregelte Qualitätssicherungs-Prozesse (z. B. Freigabeverfahren für Codefeatures) aus. Anforderungen sind hier auch für das Instrumentarium als Ganzes zu definieren (z. B. um bestimmte Prozesse für die regulatorische Bewertung abzudecken). Die Formulierung verschiedener QS-Anforderungen für die beiden Einsatzbereiche erlaubt es, im Einsatzbereich „Forschung“, Rechenprogramme zum Einsatz zu bringen, die z. B. in Teilen modifiziert wurden, ohne dass diese den kompletten (strengerem) QS-Zyklus des Einsatzbereichs „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ durchlaufen müssen.

Das BASE forscht zur Erfüllung seiner Aufgaben, betreibt also aufgabenbezogene Forschung. Durch diese Forschung entsteht Expertise zu Endlagersystemen und den darin ablaufenden Prozessen. Die regulatorische Forschung nimmt dabei eine stark sicherheitsanalytische Perspektive ein, da es letztendlich stets um die Endlagersicherheit und ihre Bewertbarkeit geht. In der Abteilung F kann im Rahmen der Forschung langfristig am Aufbau eines sicherheitsanalytischen Instrumentariums und an den zugehörigen Kompetenzen gearbeitet werden.

Notwendigkeit unabhängiger Modellrechnungen im Rahmen der Aufsicht

Eine fundierte wissenschaftliche und unabhängige Prüfung der in den Sicherheitsuntersuchungen enthaltenen Modellrechnungen der BGE mbH im Rahmen von Aufsicht und Genehmigung durch das BASE erfordert eigene Modellrechnungen. Das Instrumentarium soll mit dieser Zielsetzung qualitätsgesichert aufgebaut werden. Dies umfasst insbesondere auch die Eigenentwicklung von Rechenprogrammen. Bei Eigenentwicklungen sind die zentralen Qualitätssicherungsmaßnahmen – Entwicklungsüberprüfungen, Verifizierung und, soweit anwendbar (s. u.), Validierung – in den Programmentwicklungsprozess integriert². Näheres regelt Kap. 2.3.

Die aufsichtliche Prüfung von Modellrechnungen durch eigene Modellrechnungen auf regulatorischer Seite steht im Einklang mit der internationalen Praxis und folgt dabei Empfehlungen internationaler Organisationen. So wird beispielsweise in einschlägigen Dokumenten *ENSI (2022)* des Schweizer Eidgenössischen Nuklearsicherheitsinspektorats (ENSI) ausgeführt: „Die zentrale Aufgabe des ENSI besteht darin, die vorgeschlagenen Lösungen fachtechnisch zu begutachten und dabei zu

² Im Bereich der Software-Entwicklung hat sich der Ausdruck „Verifizierung von/der Software“ etabliert, leider ohne dass die intendierte Bedeutung immer einheitlich ist. In diesem Dokument ist mit „Verifizierung eines/des Rechenprogramms“ die Verifizierung des Programm-Entwicklungsprozesses gemäß Kap. 8.3.4.2 in *ISO (2018)* im folgenden Sinne gemeint: „Verification of software is aimed at providing assurance that the output of a design and development activity conforms to the input requirements. Verification should be performed as appropriate during design and development. Verification may comprise reviews of design and development output (e.g. by inspections and walkthroughs), analysis, demonstrations including prototypes, simulations or tests. Verification may be conducted on the output from other activities, e.g. COTS [Commercial-Off-The-Shelf], purchased and customer-supplied products. [...]“. Mit der zitierten Textstelle wird der Begriff „Verification of software“ auf das Konzept der Verifizierung eines (bei der Software-Produktion zentralen) Prozess-Schrittes, nämlich des Programm-Entwicklungsprozesses, zurückgeführt. Dies ergibt sich daraus, dass die zitierte Textstelle von *ISO (2018)* als Anwendungsempfehlung zur Norm *DIN (2015a)* sich auf Kap. 8.3.4 ebendieser Norm bezieht, wo „Steuerungsmaßnahmen für den Entwicklungsprozess“ [Originalwortwahl der deutschen Fassung der Norm] aufgelistet sind, von denen diejenige, auf die sich die zitierte Textstelle bezieht, mit „Entwicklungsverifizierung“ [Originalwortwahl der deutschen Fassung der Norm] bezeichnet wird. Demnach werden die Begriffe „Verifizierung des Entwicklungsprozesses“ bzw. „Entwicklungsverifizierung“ einerseits und „Verifizierung des Entwicklungsergebnisses“ bzw. „Softwareverifizierung“ andererseits quasi miteinander identifiziert.

beurteilen, ob die Schutzziele, Leitsätze und Sicherheitskriterien eingehalten werden“. Bezug wird hier genommen auf die Vorschläge der NAGRA für Standorte eines Endlagers für hochradioaktiver Abfälle. Zur Prüfung gibt das ENSI an: „Das ENSI führt eigene Berechnungen zu sicherheitsrelevanten Themen durch, um die Vorschläge der Entsorgungspflichtigen kompetent und unabhängig zu prüfen.“ (ENSI 2022). Um diese Berechnungen durchzuführen, nutzt das ENSI kommerzielle Rechenprogramme, die umfassend verifiziert worden sind, oder entwickelt eigene Rechenprogramme.

Die IAEA hat im Jahr 2008 das Projekt GEOSAF initiiert, mit dem Ziel, international die Anforderungen und das zugrundeliegende Regelwerk für den Sicherheitsnachweis für ein tiefengeologisches Endlager für radioaktive Abfälle zu harmonisieren (IAEA 2017). Das im 2011 abgeschlossenen Projekt GEOSAF I, IAEA (2026), fokussiert sich auf den entsprechenden Safety Case und nimmt dabei auch die Anforderungen an die Aufsichts- und Genehmigungsorganisation bzw. deren Technical Support Organization (TSO) besonders in den Blick. Der Abschlussbericht zu GEOSAF I (IAEA 2026) baut auf der Europäischen Pilot Studie (EPS 2016) auf und berücksichtigt insbesondere die spezifischen Sicherheitsanforderungen SSR-5 der IAEA (IAEA 2011), sowie eine entsprechende Leitlinie der OECD-NEA (OECD-NEA 2004). Für die Aufsichts- und Genehmigungsbehörde wird in IAEA (2026) die Fähigkeit der Nutzung und Weiterentwicklung von Rechenprogrammen als eine wesentliche Anforderung aufgeführt:

“Perform independent research externally and in-house on key safety aspects by expertise organizations or expertise units from the authorities, on areas which are complex and need better understanding, **development of modelling capabilities in order to perform independent calculations and assessment**, etc.”

Die beiden vorgenannten Beispiele zeigen, dass die Entwicklung inklusive Qualitätssicherung eigener Rechenprogramme beim BASE der international üblichen und durch Empfehlungen der IAEA ausgestalteten Praxis folgen. Entscheidend ist, dass die Modellrechnungen der BGE mbH hinsichtlich Richtigkeit und Adäquatheit geprüft und bewertet werden müssen, um die aus diesen Rechnungen abgeleitete Sicherheitsaussage bewerten zu können.

Auch aus technischer Sicht erscheint eine aufsichtliche Prüfung der Modellrechnungen der BGE mbH durch unabhängige Modellrechnungen erforderlich. Dies liegt darin begründet, dass zwar geprüft werden kann, ob Entwicklung und Anwendung von Modellen durch die BGE mbH den anzuwendenden Qualitätsstandards entspre-

chen. Nicht geprüft werden kann aber die Existenz versteckter Fehler innerhalb der Rechenprogramme oder in deren Eingabedaten. Dies kann bedeuten, dass trotz der Einhaltung der QS-Richtlinien bestimmte Fehler oder Inkonsistenzen in den Rechenprogrammen oder Eingabedaten vorhanden sind. Das Vertrauen in die Modellrechnungen der BGE mbH wird daher maßgeblich durch erfolgreiche Reproduktion der Modellierungsergebnisse durch unabhängige Modelle und ggf. auch durch komplementäre Modellierungsansätze gestärkt.

Eigene Modellrechnungen auf regulatorischer Seite erlauben zudem, der Auswirkung von Prozess- oder Datenungewissheiten eigenständig nachzugehen; ein sensibler Punkt, bei dem ansonsten die Bewertung der BGE mbH unüberprüft bleiben müsste. Auch die Auswirkungen alternativer Prozesskonzeptionen und -umsetzungen in verschiedenen Rechenprogrammen lassen sich durch eigene Modellrechnungen überprüfen. Eine tiefgehende fachliche Prüfung der Modellierungen der BGE mbH wird daher nur durch eigene Modellrechnungen auf regulatorischer Seite möglich.

Modellierung im Rahmen der aufsichtlichen Prüfung

Der strategische Aufbau des modelltechnischen Instrumentariums kann in Abstimmung zu den aufsichtlichen Aufgaben des BASE erfolgen. Hierbei können folgende Aspekte eine Rolle spielen:

- Komplementäre Aspekte: Das BASE strebt für die Prüfung des Standortregionenvorschlags eine möglichst umfängliche Betrachtung für die Methoden- und Ergebnisbewertung des sicheren Einschlusses nach § 4 Endlagersicherheitsanforderungsverordnung (EndLSiAnfV) an. So können Prozesse ggf. auch komplementär zur Schwerpunktsetzung der BGE mbH untersucht werden, um abgeleitete Sicherheitsaussagen vergleichen zu können. Je nach angewandter Prüftiefe können dabei vollumfängliche Nachrechnungen notwendig sein, um die Reproduzierbarkeit der BGE-Ergebnisse sicherzustellen. In diesem Zusammenhang ist auch die Anwendung von Rechenprogrammen, die von der BGE unabhängig sind, für numerische Verifikation vorgesehen.
- Gerade in den repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (rvSU) können Prozesse mit (semi)analytisch lösbaren Modellansätzen beschrieben werden. Aber auch schon in diesem Stadium ist für eine abdeckende Betrachtung die Anwendung von Rechenprogrammen notwendig. Grundsätzlich ist die Verfügbarkeit sowohl vereinfachter als auch komplexer Modellansätze sinnvoll, um eine flexible Ausgangsbasis für die Prüfung des Standortregio-

nenvorschlags zu schaffen. Wenn bereits auf Ebene vereinfachter Modelle Abweichungen in Modellierungsergebnissen beobachtet werden, kann dies beispielsweise Anstoß zu einer weiterführenden Betrachtung im Rahmen einer Erhöhung der Prüftiefe geben.

Generell werden im Rahmen des Genehmigungsprozesses enge Terminpläne herrschen. Daher wird es nötig sein, das Instrumentarium so zu konstruieren, dass dessen Einsatz nicht zeitaufwändig ist. Dies gilt auch für die Berücksichtigung der den Modellierungen durch die Rechenprogramme zugrunde liegenden Ungewissheiten (Parameter und Modellannahmen). Erreicht werden kann dies u. a. durch den Einsatz weitgehend automatisierter Workflows für das notwendige Pre- und Postprocessing.

Am Ende einer jeden Phase des Standortauswahlverfahrens (StandAV) wird es zu einer Bewertung der Vorschläge der BGE mbH durch das BASE kommen. Die BGE mbH hat im Oktober 2022 eine revidierte Fassung ihrer Zeitplanung für das StandAV veröffentlicht (BGE 2022). Daraus lässt sich der Zeitrahmen für die Prüfungen durch das BASE für zwei verschiedene Szenarien (Szenario A: Erkundung von 6 Standortregionen in den Phasen II und III; Szenario B: Erkundung von 10 Standortregionen in den Phasen II und III) ablesen:

1. Ende Phase I: Prüfung der rvSU durch das BASE im Jahr 2027.
2. Ende Phase II: Prüfung der weiterentwickelten vorläufigen SU durch das BASE im Jahr 2039 (Szenario A) bzw. 2041 (Szenario B).
3. Ende Phase III: Prüfung der vorläufigen umfassenden SU durch das BASE im Jahr 2041 (Szenario A) bzw. 2066 (Szenario B).

Die Anforderungen an die Komplexität des zu entwickelnden Instrumentariums für das Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ leiten sich wesentlich aus den verschiedenen Komplexitätsgraden der Bewertung von Sicherheitsuntersuchungen im Verlauf des StandAV ab. Rechenprogramme, die zur Bewertung der rvSU am Ende der Phase I eingesetzt werden, bedürfen in Bezug auf die in ihnen abgebildeten Prozesse und deren Detailierungsgrad einer weitaus geringeren Komplexität, als die zur Bewertung der Langzeitsicherheitsanalysen am Ende der Phase III. Diese Aspekte sind bei der Entwicklung bedarfsgerechter Rechenprogramme zu berücksichtigen. Aus der Auflistung der abgeschätzten Zeitpunkte zeigt sich, dass zunächst ein lauffähiges und qualitätsgesichertes Codesystem vorliegen muss, welches noch nicht unbedingt einen hohen Detailierungsgrad in Hinblick auf die berücksichtigten Prozesse haben muss³. Dieser kann später (z. B. durch die Arbeit

³Es kann beispielsweise zunächst ausreichend sein, die zugrundeliegenden Systeme eindimensio-

an orientierenden Modellierungen) entwickelt werden.

Für den Einsatz innerhalb des StandAV müssen die zum Einsatz kommenden Rechenprogramme bedarfsgerecht entwickelt sein, d. h. dass der abgebildete Detaillierungsgrad der sicherheitsrelevanten Prozesse von der erforderlichen Prüftiefe abhängt.

Die Strategie zur Entwicklung von Rechenprogrammen in der Abteilung F soll diversitär ausgerichtet sein. Dies bedeutet, dass bei einer möglichen Bewertung im Aufsichts- und Genehmigungsverfahren funktionsähnliche Rechenprogramme mit komplementären Modellansätzen, idealerweise von verschiedenen Modellierungsteams innerhalb des BASE eingesetzt werden können. Die Diversität innerhalb der Codelandschaft in der Abteilung F trägt wesentlich zur Vertrauensbildung in die Ergebnisse der Rechenprogramme bei und erlaubt außerdem die Detektion möglicher Fehler in den Rechenprogrammen. Eine diversitäre Strategie wurde beispielsweise in *Navarro u. a. (2019)* angewendet. Eine mögliche Gegenprüfung von BGE-Rechnungen erfolgt dann mit BASE-eigenen Codes, die sich von denen der BGE mbH unterscheiden.

Neben der Nachrechnung von Sicherheitsanalysen, umfasst die regulatorische Prüfung von Sicherheitsanalysen auch isolierte Einzelprozessbetrachtungen, die zu einem vertieften Systemverständnis beitragen. Diese können auf alternative Modellannahmen oder Modellierungsansätze abzielen. Die Sammlung von Rechenprogrammen muss dazu ausreichend flexibel sein. Das kann durch Codes mit großem Funktionsumfang erreicht werden, aber auch durch Codes, die ohne größere Schwierigkeiten modifiziert oder entsprechend der Bedarfe aus den zu betrachtenden Einzelprozessen erweitert werden können. Die Weiterentwicklung eigener Rechenprogramme trägt zu einem vertieften Prozessverständnis und zum Aufbau von Kompetenz zur Bewertung von Modellrechnungen bei. Außerdem kann so schnell auf Probleme und Einschränkungen reagiert werden, deren Lösung bei handelsüblichen Codes unzumutbar lange dauern würde. Dies kann vor allem bei der Überprüfung unter Zeitdruck eine Rolle spielen.

2.1.2 Forschung

Das Einsatzbereich „Forschung“ unterscheidet sich vom Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ im vorliegenden Kontext im Wesentlichen

nal und ohne eine THMC gekoppelte Rechnung zu betrachten. Ein Beispiel hierfür sind die Rechnungen zu den EndlSiAnfV (*Navarro u. a. 2019*).

durch die genutzten Rechenprogramme und durch eine größere Freiheit bei der Wahl der zu modellierenden Problemstellungen. Der Einsatzbereich „Forschung“ dient der Durchführung aufgabenbezogener Forschung (in Form von Inhouse-Forschung durch das BASE oder durch das BASE vergebener Auftragsforschung⁴), die zur Erfüllung der gesetzlichen Aufgaben des BASE im StandAV notwendig ist. Es soll keine reine Grundlagenforschung betrieben werden. Grundsätzlich soll der Einsatzbereich „Forschung“ dazu dienen, durch die intensive wissenschaftliche Beschäftigung mit auch aufsichtlich relevanten Fragestellungen, Kompetenzen zur Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen weiter auszubauen und auch Fragestellungen und Prozesse zu identifizieren, die für eine bewertende Tätigkeit relevant werden können. Dies erlaubt es, Themen zu bearbeiten, die zunächst nur indirekten Bezug zur aufsichtlichen Tätigkeit haben.

Die Codes des Einsatzbereiches können daher frei gewählt werden und bedürfen keiner Ausrichtung am aufsichtlichen Modellierungsbedarf. Gleichwohl ist es zur Nutzung von Synergieeffekten (zeitliche Kapazitäten, Know-How) sinnvoll weitestgehend die gleichen Rechenprogramme einzusetzen. Abweichende Rechenprogramme können sinnvoll sein, um ein umfassenderes Verständnis zu entwickeln. Die Qualitätssicherungsmaßnahmen für die Codes dürfen den in der Forschung üblichen Standards entsprechen; sie sind in Kap. 2.3 spezifiziert.

2.2 Anforderungen an die Rechenprogramme

2.2.1 Allgemeine Anforderungen

Grundsätzlich sollen die in der Abteilung F des BASE entwickelten Rechenprogramme Open-Source, also mit einem der Allgemeinheit zugänglichen Quellcode entwickelt werden. Bei Rechenprogrammen, die in Teilen kommerzielle Entwicklungen nutzen, sind lizenzrechtliche Aspekte zu beachten. Die Idee einer grundsätzlich quelloffenen Entwicklung folgt dem Transparenzgebot des StandAV und soll es der interessierten Öffentlichkeit ermöglichen, mit den im BASE entwickelten Rechenprogrammen Teile der Langzeitsicherheitsuntersuchungen der BGE mbH nachzuvollziehen, oder Einzelprozesse von Interesse nachrechnen zu können. Die Testfälle zur Verifizierung und Validierung (siehe Kapitel 5) sollen ebenfalls der Allgemeinheit zugänglich sein. Diese Maßnahmen sollen mit dazu beitragen, das Vertrauen in die

⁴Bei Rechenprogrammen, die das Ergebnis von durch das BASE vergebener Auftragsforschung sind, sollten die in diesem Dokument formulierten Anforderungen dann zur Anwendung kommen, wenn diese Rechenprogramme in der Abteilung F selber angewendet werden.

regulatorischen Bewertungen des BASE zu stärken. Um trotz der Idee der quelloffenen Entwicklung die Idee eines diversitären Ansatzes zu schützen, kann es ggf. notwendig sein, den Quellcode eines Rechenprogramms für das Anwendungsgebiet „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ erst nach dem Abschluss der Phasen des StandAG zu veröffentlichen, nach welchen jeweils die Prüfung durch das BASE einsetzt.

2.2.2 Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“

Rechenprogramme, die beim BASE im Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ zum Einsatz kommen, müssen umfassend qualitätsgesichert sein. Die konkreten Qualitätssicherungsmaßnahmen der Entwicklungsüberprüfung, Verifizierung und, soweit anwendbar, Validierung finden sich in Kapitel 2.3. Im StandAV ist eine langfristige Nutzbarkeit der eingesetzten Rechenprogrammen notwendig, was einen langfristigen Kompetenzerhalt erforderlich macht. Bei Rechenprogrammen oder Bibliotheken, die außerhalb des BASE entwickelt werden, ist diese langfristige Perspektive nicht unbedingt gegeben, was im Falle ihrer Verwendung berücksichtigt werden muss. Für Eigenentwicklungen im BASE bedeutet dieser langfristige Zeitrahmen, dass organisatorische und personelle Randbedingungen diesem Rechnung tragen müssen. Gleichzeitig sollen die Rechenprogramme ressourcenschonend konzipiert sein. Auf der Entwicklungsseite bedeutet dies, dass der Aufwand für Weiterentwicklung und Wartung der Rechenprogramme im Hinblick auf die personellen Ressourcen klein gehalten werden sollte. Dies kann durch eine verständliche und nachvollziehbar dokumentierte Art der Programmierung und durch einen gut geplanten Wissens- und Kompetenzerhalt erzielt werden. Auf der Anwenderseite wird dieses Ziel erreicht, indem Rechenprogramme so entwickelt werden, dass ihre Bedienung nutzerfreundlich ist und insbesondere durch eine gut nachvollziehbare Dokumentation erleichtert wird. Dies beinhaltet auch einen vertretbaren Aufwand beim Pre- und Postprocessing durch Anbindung der Rechenprogramme an zeitgemäße Werkzeuge, was für eine effiziente Auswertbarkeit und Interpretierbarkeit der Rechenergebnisse sorgt.

Die Gesamtheit der in der Abteilung F verwendeten Rechenprogramme soll sich idealerweise nicht auf bestimmte Arten von Rechenprogrammen fokussieren. In einem gemischten Instrumentarium (z. B. leistungsfähige Multiphysics-Codes neben einfachen, auf Einzelprozesse ausgelegten Codes) können sich die Stärken der Rechenprogramme komplementieren und ergänzen. Dieser Ansatz wird bereits durch

die sich gerade in diesem Punkt ergänzenden Inhouse-Forschungsprojekte OSTHM und ERLa verfolgt⁵. In einem regelmäßigen zeitlichen Abstand sollten bestehende Entwicklungslinien für Rechenprogramme einer kritischen Überprüfung unterzogen werden.

Zusammenfassend sind diese Anforderungen von Bedeutung:

- Komplementarität,
- Open-Source,
- Umfassende Qualitätssicherung der Codes und aller benötigten Hilfscodes,
- Langfristige Nutzbarkeit (Dauer StandAV),
- Ressourcenschonende Entwicklung (Wartbarkeit der Rechenprogramme),
- Vollständige Dokumentation (erlaubt effiziente Anwendung),
- Adäquates Pre- und Postprocessing.

2.2.3 Einsatzbereich „Forschung“

Die folgenden Anforderungen gelten für Codes, die ausschließlich im Einsatzbereich „Forschung“ zum Einsatz kommen. Für Codes, die zusätzlich auch im Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ zum Einsatz kommen, gelten die für dieses Gebiet definierten Anforderungen.

Rechenprogramme für das Einsatzbereich „Forschung“ im BASE müssen korrekte Ergebnisse liefern und verifiziert sein. Gleichwohl kann die Entwicklung geeigneter Verifizierungsbeispiele und entsprechender Werkzeuge selbst Bestandteil von Forschung und Entwicklung sein, sodass es im Rahmen von Forschung dazu kommen kann, dass Implementierungen physikalischer Prozesse untersucht werden, bezüglich derer das Rechenprogramm zur Bearbeitungszeit noch nicht verifiziert ist. Rechenprogramme, die ausschließlich zur Forschung eingesetzt werden, müssen nicht über die Dauer des StandAV verfügbar gehalten werden. Vielmehr ist es entscheidend, die gewonnen Erkenntnisse gut dokumentiert über die Dauer des Verfahrens verfügbar zu halten, so dass diese zu gegebener Zeit, wenn erforderlich, in die Rechenprogramme für das Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ übertragen werden können. Im Einsatzbereich „Forschung“ sind Nutzer und Entwickler der Rechenprogramme häufig identisch. Deshalb müssen Nutzerfreundlichkeit und Dokumentation der Rechenprogramme nicht so umfassend wie im Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ sein.

⁵Entwicklung einer hauseigenen Open-Source THM Modellierungstoolbox (OSTHM), Laufzeit 01.01.22–31.12.24 (Rücker 2025)

Insgesamt sind die Rechenprogramme flexibler und nicht auf die Dauer des StandAV ausgerichtet.

Zusammenfassend sind diese Anforderungen und Eigenschaften von Bedeutung:

- Verifizierung kann selbst Bestandteil von Forschung sein.
- Kürzere Anwendungsdauer (losgelöst von Zeitrahmen StandAV), in der jedoch die Wartbarkeit gegeben sein muss.
- Rechenprogramme sind flexibler, auf Einzelfragestellungen zugeschnitten.

Die Anforderungen des Einsatzbereiches grenzen sich von den Anforderungen des Einsatzbereiches „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ im Wesentlichen dadurch ab:

- Die Rechenprogramme müssen nicht notwendigerweise durch Entwicklungsüberprüfung, Verifizierung und Validierung qualitätsgesichert sein. Einzelne Verifizierungstätigkeiten sind, soweit sie transparent in den Forschungsberichten dokumentiert sind, zur Qualitätssicherung ausreichend.

Die Dokumentation der Programme muss so umfassend sein, wie zur Nutzung des Programms durch das Entwicklungs-/Forschungs-Team notwendig. Das ist nicht so umfangreich wie es bei Nutzung des Programms durch ein Anwendungs-Team (wie im Einsatzbereich „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“) notwendig wäre.

2.3 Qualitätssicherungsmaßnahmen

Im Folgenden sollen einheitliche Grundzüge für die Qualitätssicherung der in der in der Abteilung F des BASE verwendeten Rechenprogramme festgelegt werden. Ziel ist es, einheitliche Standards festzulegen, um so das Vertrauen in die Ergebnisse der Rechenprogramme zu stärken und die Verlässlichkeit der aus den Ergebnissen abgeleiteten Aussagen zu untermauern. Diese Grundzüge beschränken sich dabei nicht auf die eigentlichen Rechenprogramme, sondern schließen auch Hilfsskripte oder Hilfsprogramme für das Pre- und Postprocessing ausdrücklich mit ein. Die konkrete Umsetzung der hier festgelegten Grundzüge soll für jedes Rechenprogramm in einem QS-Plan spezifiziert und auf dessen konkrete Anforderungen hin festgelegt werden. Der QS-Plan bezieht sich auf ein Simulationsprogramm. Er soll insbesondere ausweisen, welche Teile des Programms auf welche Weise qualitätsgesichert sind und für welche Einsatzgebiete sie sich aufgrund dessen eignen. Im Falle des Einsatzgebietes „Aufsicht und Genehmigung“ ist die Qualitätssicherung des assoziierten Pre- und Postprocessings ebenfalls darzulegen. Daneben soll der QS-Plan

Richtlinien für die Codeentwicklung (soweit Qualitätsanforderungen betroffen sind) und die Qualitätssicherung darlegen und die Dokumentation aufnehmen, inwieweit diese Richtlinien umgesetzt wurden (Soll-Ist-Vergleich).

Die hier beschriebenen QS-Maßnahmen richten sich zunächst an das Fachgebiet F4, kann aber nach Absprache auf alle Mitarbeitenden der Abteilung F des BASE, die mit den Aufgaben Entwicklung und Qualitätssicherung von Rechenprogrammen betraut sind, ausgeweitet werden. Gleichzeitig soll durch eine mögliche Veröffentlichung der QS-Maßnahmen dem Gebot der Transparenz im StandAV Rechnung getragen werden und das Vertrauen in Aussagen des BASE, die wesentlich auf dem Ergebnis von Rechenprogrammen aufbauen, gestärkt werden. Sollten Teile eines Rechenprogramms außerhalb des BASE entwickelt werden (z. B. Stoffwert-Bibliotheken oder numerische Routinen), so ist sicherzustellen, dass die QS-Maßnahmen auch dort in vergleichbarer Form angewendet werden. Wo dies nicht möglich ist, sind (in Anlehnung an Kap. 8.4.2 in *ISO (2018)*) geeignete Verifizierungstätigkeiten durchzuführen, um sicherzustellen, dass das extern entwickelte Programm-Teil und das Gesamtprogramm jeweils seine Qualitätsanforderungen erfüllt. Dies gilt auch für die bei der Kopplung von Rechenprogrammen verwendeten Schnittstellentools.

Die folgenden QS-Maßnahmen beziehen sich auf die Programmentwicklung, also die Bereitstellung, von Modellierungswerkzeugen, nicht auf die Gewährleistung der Qualität ihrer Anwendung in Sicherheitsanalysen. Hierfür sollten im Grundsatz ebenfalls QS-Maßnahmen eingeführt werden.

Wie bereits einleitend erwähnt, verwendet die folgende Darstellung die Begriffe und orientiert sich an den Konzepten der Normenreihe (*DIN 2015b*; *DIN 2015a*) und (*ISO 2018*)⁶. Das Attribut „qualitätsgesichert“ wird im Folgenden für Produkte des hier beschriebenen Instrumentariums (Rechenprogramme, Hilfscodes) verwendet, die festgelegte Qualitätssicherungsmaßnahmen durchlaufen haben.

2.3.1 Entwicklungsplanung

Die Konzeption des Rechenprogramms ist festzulegen. Dabei sind Festlegungen zur Auswahl geeigneter physikalischer oder chemischer Prozesse und den ihnen

⁶Die hier dargestellten QS-Maßnahmen nehmen nicht Bezug auf die einschlägigen Begrifflichkeiten der entsprechenden Publikationen der IAEA und NEA, da die dort verwendeten Begrifflichkeiten in Teilen inkonsistent formuliert sind. Gleichwohl verfolgen sowohl die vorgenannten Arbeiten als auch die DIN und ISO-Normen identische Zielsetzungen. Der in *BMU (2020)* und *BAnz (2022)* verwendete Begriff der „Qualifizierung“ ist synonym für den in diesem Dokument und in den genannten DIN und ISO-Normen Begriff der Qualitätssicherung zu verstehen. Beide Begriffe fassen die in diesem Kapitel genannten Maßnahmen zusammen.

zugrundeliegenden Annahmen und Gleichungen nachvollziehbar festzuhalten. Festlegungen zu Programmiersprache, Programmierstil, Variablenbenennung und Kommentierung sollten so beschaffen sein, dass die Rechenprogramme effizient wart- und erweiterbar sind. Für das Anwendungsgebiet „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ sind diese Festlegungen insbesondere vor dem Hintergrund eines möglichen langen Anwendungszeitraums der Programme innerhalb des StandAV zu treffen.

Für das Anwendungsgebiet „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ soll bei der Programmierung darauf geachtet werden, den Anwendenden unübersehbar kenntlich zu machen, wenn in der Anwendung der Rechenprogramme der Gültigkeitsbereich der zugrundeliegenden Modelle überschritten wird. Die Rechenprogramme sollen innerhalb eines Versionsmanagementsystem entwickelt werden. Jede Version des Rechenprogramms soll dabei eindeutig versioniert und nachvollziehbar archiviert werden. Die Entwicklungsschritte der Rechenprogramme sollen durch über längere Zeiten verständliche Mitteilungen im Versionsmanagementsystem auch für spätere Entwickler nachvollziehbar bleiben. Neue Entwicklungen sollen durch Regressionstests innerhalb eines Continuous Integrationsystems in bestehende Versionen eingebettet werden⁷.

Für das Anwendungsgebiet „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ sind neue Anwenderversionen freizugeben und die Freigabe ist zu dokumentieren. Eine Freigabe kann hier grundsätzlich erst nach Evaluierung der Verifizierungs- und Validierungstätigkeiten bzgl. der geänderten Programmversion erfolgen. Sie kann auch die Nutzung bestimmter Programmfunktionen ausschließen.

2.3.2 Verifizierung des Rechenprogramms

Die Verifizierung ist für beide Anwendungsgebiete die zentrale Säule der QS-Maßnahmen. Ganz allgemein ist Verifizierung die „Bestätigung durch Bereitstellung eines objektiven Nachweises, dass festgelegte Anforderungen erfüllt worden sind“ (Kap. 3.8.12 in *DIN (2015a)*). Festgelegte Anforderungen können z. B. auch die Codestruktur betreffen. In der Programmentwicklung ist das Ergebnis des Entwicklungsprozesses das lauffähige Rechenprogramm und durch die Verifizierung

⁷Ein Regressionstestfall ist ein definierter Testfall, der auf verschiedene Versionen des Rechenprogramms angewendet wird, wenn die neuere Version z. B. durch Änderungen am Quellcode innerhalb des Coderepository entsteht. Die Anwendung erfolgt bei Einspielung der Änderung in das Coderepository innerhalb eines Continuous Integrationsystems, d. h. durch das automatisierte Abfahren der o. g. Tests.

soll sichergestellt werden, dass das Programm den in der Entwicklungsplanung festgehaltenen Anforderungen entspricht (siehe auch Fußnote 2). Dies schließt für die im BASE entwickelten Rechenprogramme grundsätzlich Korrektheit ein, d. h. dass die Rechenprogramme in der Weise ablaufen und die Ergebnisse liefern, die die in ihnen implementierten Modelle und numerischen Verfahren (bei Berücksichtigung der Rechengenauigkeit) erwarten lassen. Festgelegte Anforderungen können z. B. auch die Codestruktur betreffen. Die Verifizierungstätigkeiten sollen dabei diese Punkte umfassen:

- Es werden geeignete Testfälle entwickelt, um die Korrektheit und Robustheit des Rechenprogramms zu verifizieren. Die Testfälle sollten sich auf die implementierten Einzelprozesse in den Rechenprogrammen fokussieren und typische Anwendungssituationen berücksichtigen. Geeignet dafür ist der Vergleich zu (semi-)analytischen Lösungen und der Vergleich zu experimentellen Daten soweit verfügbar. Der Vergleich mit den Ergebnissen anderer Rechenprogrammen kann als zusätzlicher Verifizierungsschritt sinnvoll sein. Die Testfälle können sowohl einzelne Bereiche des Rechenprogramms überprüfen, als auch das Rechenprogramm in seiner Gesamtheit.
- Für das Einsatzgebiet „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ sind Korrektheit und Robustheit des Rechenprogramms zusätzlich durch mindestens einen Testfall zu verifizieren, der ein Phänomen betrachtet, das für die Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen relevant ist und aus mehreren, sich teils überlagerten Einzelprozessen besteht. Ziel kann es hierbei auch sein, andere Zustände des Rechenprogramms abzuprüfen, die bei Einzeltest nicht auftauchen können.

Zur Verifizierung des Rechenprogramms müssen für beide Einsatzgebiete Regressionstest etabliert werden. Zusammen mit einem System zur Continuous Integration kann so vor der Freigabe und während der Entwicklung einer neuen Programmversion überprüft werden, ob Fehler oder unbeabsichtigtes Verhalten des Rechenprogramms gegenüber der Vorversion auftreten (siehe Fußnote 7).

2.3.3 Validierung der Rechenprogramme

Ganz allgemein ist Validierung die „Bestätigung durch Bereitstellung eines objektiven Nachweises, dass die Anforderungen für einen spezifischen beabsichtigten Gebrauch oder eine spezifische beabsichtigte Anwendung erfüllt worden sind“ (Kap. 3.8.13 in *DIN (2015b)*). In der Programmentwicklung ist das Ergebnis des Entwick-

lungsprozesses das lauffähige Rechenprogramm und durch die Validierung soll gezeigt werden, dass das Programm den operativen und anwenderbezogenen Anforderungen entspricht („providing reasonable confidence that it will meet its operational requirements and user needs“ (ISO 2018), siehe auch Fußnote 6). In Bezug auf die Korrektheit eines Rechenprogramms für die Anwendung in Langzeitsicherheitsbewertungen ist der Nachweis für den beabsichtigten Gebrauch dann unmöglich, wenn darunter der Vergleich der Simulationsergebnisse mit der realen Entwicklung des Endlagersystems (über den Nachweiszeitraum von 1 Million Jahre) verstanden wird. Tatsächlich wäre ein solcher Vergleich ein Validierungs-Ideal, welches aber nicht umsetzbar ist. Die Norm ISO (2018) fordert für den Fall, dass eine vollständige Validierung des Rechenprogramms nicht möglich ist, festzulegen, wie Vertrauen auf andere Weise gewonnen werden kann und welche Tests stattdessen durchgeführt werden können, die das Vertrauen in die Anwendungsfähigkeit des Programms erhöhen⁸. In diesem Sinn wird eine (Teil)Validierung des Simulationsprogramms für bestimmte endlagersystemnahe Standardprobleme dargestellt, für die dann analytische Referenzlösungen, experimentelle Daten oder Benchmark-Ergebnisse vorliegen. Auch die blinde Vorausrechnung eines Experiments kann zur (Teil)Validierung verwendet werden. Die Diversifizierung der Rechenprogramme erlaubt zusätzlichen Vertrauensgewinn in die Korrektheit von numerischen Rechenergebnissen durch den Vergleich verschiedener numerischer und mathematischer Ansätze für die jeweilige Modellaufgabe. Für das Einsatzgebiet „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ sollte die Verifizierung der Ablauffähigkeit des Rechenprogramms auf den Plattformen und Betriebssystemen erfolgen, auf denen die Rechnungen ausgeführt werden sollen. Hierbei sind insbesondere Optimierungen zur Laufzeit auf einen möglichen Einfluss auf die Ergebnisse hin zu untersuchen.

Frühere Betrachtungen der Problematik der Validierung von Langzeitsicherheits-Simulationsprogrammen finden sich z. B. in *Bogorinski u. a. (1996)*, Kap. 5 ebenda, und in *(Beisbart u. a. 2019)*. Validierung bzw. Teilvalidierung sollte für alle Rechenprogramme des Einsatzgebietes „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ vor Freigabe einer neuen Anwenderversion erfolgen.

⁸Weiter heißt es in Kap. 8.3.4.3 in ISO (2018): „In some cases, it can be impossible, or unfeasible, to validate fully the software product by measurement and monitoring. An example can be where safety-related software cannot be tested under actual circumstances without risking serious consequences, or perhaps the actual circumstances themselves are rare and difficult to simulate. The inability to test some software products exhaustively and conclusively may lead the organization to decide, a) how confidence can be gained from the development and tools used, and b) what types of testing or analysis can be performed to increase confidence that the product will perform correctly under the “untestable” circumstances, e.g. static code analysis. – Whatever methods are used, they should be commensurate with the risk and consequences of design and implementation failures.”

2.3.4 Dokumentation des Rechenprogramms

Begleitend zur Entwicklung (inkl. Verifizierung) eines Rechenprogramms muss eine Dokumentation erstellt werden, die mindestens das Programm in der Tiefe und dem Umfang beschreibt, wie es für die vorgesehene Nutzung notwendig ist (für das Einsatzgebiet „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“ ist dies umfangreicher anzusetzen als für das Einsatzgebiet „Forschung“), und die zentralen Elemente der Verifizierung darstellt, die für das Vertrauen in die Rechenergebnisse von Bedeutung sind. Die Dokumentation gliedert sich inhaltlich in:

- **Programmdokumentation** – Enthält neben der physikalisch/technischen Aufgabenstellung und dem Anwendungsbereich des Rechenprogramms, eine detaillierte inhaltliche Beschreibung. Dies umfasst die Darstellung der zu lösenden Gleichungen, Randbedingungen, physikalischen Modelle und dahinterstehenden Annahmen, sowie die Methoden zum Lösen der zugrundeliegenden Gleichungen. Wo möglich, sollen diese Annahmen begründet werden und Vereinfachungen sollen plausibel dargestellt werden. Insbesondere sollten die Grenzen des Codes (in Bezug auf die Prozessdarstellung und die numerischen Fähigkeiten) klar angegeben werden. Idealerweise sind die beschriebenen Modelle mit einer technischen Beschreibung der Programmroutinen verknüpft. Die Dokumentation soll auch durch erläuternde Kommentare innerhalb des Quellcodes erfolgen, um den Aspekt einer langfristigen Entwicklung der Rechenprogramme innerhalb des StandAV zu berücksichtigen.
- **Für das Anwendungsgebiet „Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung“: Benutzerdokumentation** – Hier werden Bedeutungen und Struktur der Eingabedaten, eventuell mit Erläuterung von Standardwerten, und der Ausgabedaten dargelegt. Gegebenenfalls sollten Installationshinweise gegeben werden. Die Benutzerdokumentation kann auch Hinweise für eine effiziente Nutzung des Programms beinhalten. Die Benutzerdokumentation für das Einsatzgebiet „Forschung“ kann sich auf die wichtigsten Aspekte beschränken.
- **Testdokumentation** – Hier sind die zur Verifizierung des Rechenprogramms genutzten Tests zu beschreiben und ausgewählte Ergebnisse zu zeigen. Die Beschreibung umfasst die Problemstellung, die relevanten Gleichungen und die gewählten Parameter. Testfälle für die Regressionstest sind ebenfalls in dieser Dokumentation mit aufzunehmen. Der Nutzer sollte die Möglichkeit haben, alle notwendigen Regressionstests nach der Installation des Programms selbst durchzuführen. Alle dafür notwendigen Informationen sollten bereitgestellt werden (einschließlich der Erläuterung von Fehlermeldungen). Für das Aufga-

bengebiet „Forschung“ ist es ausreichend, ausgewählte Tests darzustellen.

- Die gesamte Dokumentation soll einer bestimmten Version des Rechenprogramms zugeordnet sein. Bei Neuerungen im Rechenprogramm ist die Dokumentation zu aktualisieren.

2.3.5 Ergänzende Maßnahmen

Häufig besteht zwischen der Anforderung eines breiten Funktionsumfangs eines Rechenprogramms und seiner Wartbarkeit ein Spannungsverhältnis. Dies ist aus der Erfahrung darin begründet, dass die Entwicklung von Rechenprogrammen oft nicht in Zusammenhang mit dem langfristigen nachfolgenden Aufwand für die Pflege des Quellcodes, Qualitätssicherung, Dokumentation und Kompetenzerhalt gedacht wird. Das betrifft auch unterstützende Entwicklungen für die eigentlichen Rechenprogramme, wie z. B. kleine Skripte zur Visualisierung von Simulationsergebnissen. Daher sollte regelmäßig eine Konzentration, Koordination und Kondensation der Entwicklungen vorgenommen werden, um diesen Aufwand abschätzen und planen zu können. Vor der Entscheidung, bestehende Entwicklungslinien weiterzuführen, ist zu überprüfen, ob die dokumentierten Anfangsgründe einer Entwicklungslinie sich noch mit den aktuellen Zielen und Anforderungen decken. Es könnte möglich sein, dass fortschrittlichere Rechenprogramme den aktuell genutzten überlegen sind. In diesem Fall kann es effizienter sein, auf die Weiterentwicklung des moderneren Programms zu wechseln, als bestehende Programme zu modernisieren.

Für eigenentwickelte Rechenprogramme ist das Feedback und die Erfahrung von großem Nutzen. Es sollten Verfahren umgesetzt werden, die es den Nutzern ermöglichen, Unstimmigkeiten und mögliche Fehler im Code effizient zu melden. Die Verfahren sollten dann weitere Maßnahmen seitens des Entwicklers festlegen (z. B. Dokumentation, Prüfung, Umsetzung im Rechenprogramm).

3 Softwareplanung

Jens Eckel, Carsten Rücker

In den Inhouse-Forschungsprojekten OSTHM (Rücker 2025) und ERLa war vorgesehen, dass im Rahmen der im Kapitel 2 beschriebenen Strategieentwicklung ein Vorschlag erarbeitet wird, welche der Rechenprogramme, die in beiden Projekten bearbeitet werden, zukünftig in der Abteilung F prioritär weiterzuentwickeln sind. Die folgenden Überlegungen bauen zum einen auf der in Kapitel 2 Entwicklungsstrategie zu Modellierungswerkzeugen und zum anderen auf den in beiden Forschungsprojekten gewonnen Erfahrungen auf.

Zur Entscheidung welches der beiden Rechenprogramme, PFLOTRAN und TOUGH3, zukünftig beim BASE weiter entwickelt wird wurden im Rahmen des Forschungsprojekts die Rechenprogramme einer vergleichenden Analyse unterzogen. Dabei fand eine Gegenüberstellung der grundsätzlichen Vor- und Nachteile der beiden Rechenprogramme statt, insbesondere im Hinblick auf eine Erweiterung des Quellcodes. Diese Erweiterung wäre sowohl für TOUGH3 als auch für PFLOTRAN notwendig und soll vor allem die bei der GRS entwickelten Teile des Programms TOUGH2-GRS beinhalten. Der Vergleich ist in das Kapitel integriert worden.

3.1 Rechenprogramme

Zur besseren Einordnung der strategischen Festlegungen werden zunächst die relevanten Rechenprogramme kurz vorgestellt. Hierbei liegt der Schwerpunkt auf den für die getroffene Entscheidung relevanten Aspekten.

Oskar

Die Finite Elemente Softwarebibliothek Oskar ist das Resultat des Inhouse-Forschungsprojekts OSTHM und eine hauseigene Open Source Modellierungstoolbox für THM⁹ gekoppelte physikalische Prozesse im porösen Medium (Rücker 2025). Der Fokus von Oskar liegt auf einer einfachen Schnittstelle zur Lösung der thermisch-, hydrogeologischen- und linear-elastischen Erhaltungssätze mit optionalem einphasigen Stofftransport mit der Methode der Finiten Elemente. Im Gegensatz

⁹Die Abkürzung THM steht für thermo-hydro-mechanisch gekoppelte Prozesse, häufig noch erweitert um chemische (C) und biologische (B) Prozesse. In voller Kopplung wird dann von THMCB-Prozessen gesprochen.

zu monolithischen, auf einen oder mehrere physikalische Prozesse fokussierte Rechenprogramme, verfolgt Oskar zunächst den Ansatz eines generischen Löser zur flexiblen Lösung der zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichungen auf Modellgebieten mit beliebiger Geometrie in 1D-3D. Mit Hilfe dieser Lösungswerkzeuge können dann ohne größere Einschränkungen alle für THM relevanten Prozesse simuliert werden. Die Nutzerschnittstelle ist über die Scriptsprache Python mit allen damit verbundenen Vor- und eventuellen Nachteilen umgesetzt. Beispielsweise ist die Möglichkeit zur hochqualitativen (optional interaktiven) Dokumentation von Modellierungskonzepten durch Jupyter Notebooks oder die einfache Möglichkeit zur massiv parallelen Verteilung von Prozessmodellierungen zu Sensitivitätsuntersuchungen ein Vorteil. Oskar, mit Python als Scriptsprache, kann jedoch gerade für großskalige Probleme performanceseitig, hochspezialisierten monolithischen Rechenprogrammen unterlegen sein.

MARNIE2

MARNIE (Modell zur Ausbreitung von Radionukliden Im Endlagerbergwerk) ist ein Rechenprogramm zur Simulation der komplexen Stofftransportprozesse in einem lösungsgefüllten Endlager in einer Salzformation, bzw. mit Einschränkungen auch im Tonstein. Die Berechnung des lösungsgetragenen Stofftransportes erfolgt unter Berücksichtigung endlagerrelevanter Phänomene für eine prinzipiell unbegrenzte Anzahl von Stoffkomponenten, dies können sowohl Radionuklide als auch stabile Komponenten (z. B. Salz, Elemente) sein. MARNIE2 ist die entsprechende zweiphasige (Flüssig- und Gasphase) Weiterentwicklung. Die räumliche Diskretisierung von MARNIE(2) basiert auf einem finite Volumen/Differenzen Ansatz, wobei das zugrundeliegende Endlagerbergwerk auf ein eindimensionales Netzwerk abgebildet wird. Durch diese räumliche Vereinfachung ist MARNIE(2) gut geeignet, um TH2-Prozesse¹⁰ für ein Endlagersystem über den gesamten Betrachtungszeitraum in einem, auch für Sensitivitäts- und Ungewissheitsbetrachtungen, vertretbaren Zeitrahmen zu berechnen. MARNIE erlaubt durch die bestehende Kopplung an den frei verfügbaren geochemischen Reencode PHREEQC die Durchführung thermodynamischer Gleichgewichtsrechnungen und damit insgesamt die Berücksichtigung von THMC Prozessen.

MARNIE wurde unter anderem in den Vorhaben „Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben“ (VSG) (Larue u. a. 2013), in den EU-Projekten „Evaluation of elements responsible

¹⁰zweiphasige thermo-hydraulische Prozesse

for the effective engaged dose rates associated with the final Storage of radioactive waste“ EVEREST und „Spent Fuel Performance Assessment“ (SPA) sowie für das ERAM eingesetzt. In den EVEREST- und SPA-Projekten (Becker u. a. 1997; Martens u. a. 1999) wurden umfangreiche deterministische und probabilistische Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zur Langzeitsicherheit für ein Endlager im Salinar durchgeführt. MARNIE wurde außerdem zur Entwicklung von Indikatoren zur Bewertung des Einschlusses der wesentlichen Barrieren eingesetzt (Navarro u. a. 2019).

MARNIE(2) ist bei der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) seit den 90er Jahren mit Mitteln des BMU entwickelt worden und der Quellcode wird seit November 2022 seitens des BASE weiterentwickelt. Da es sich bei dem Rechenprogramm um eine komplette Eigenentwicklung handelt, besteht bzgl. der Erweiterung um endlagerrelevante Einzelprozesse und der notwendigen Modernisierung des Programms größtmögliche Flexibilität.

TOUGH

TOUGH3 (Jung u. a. 2017) ist als Zusammenführung der Rechenprogramme TOUGH2 (V2.1, seriell) und TOUGH2-MP (V2.0, parallelisiert) entstanden. TOUGH3 ist in der Lage, mehrkomponentigen Multiphasenfluss (mit Wärmetransport) in porösen und geklüfteten Medien zu beschreiben. Dazu stellt TOUGH3 verschiedene EOS (equation-of-state) Module zur Verfügung, die die entsprechenden den Phasen und Komponenten zugeordneten physikalischen Größen beinhalten. Das EOS Modul wird bei Erstellung des ausführbaren Rechenprogramms mit dem TOUGH3 Kern verbunden, in dem die zugrundeliegenden Differentialgleichungen aufgestellt und gelöst werden. TOUGH3 nutzt zur Parallelisierung die PETSc Bibliothek (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation (Satish Balay u. a. 2023)) zur Lösung des Gleichungssystems und ist damit gegenüber den Vorgängerversionen laut Aussagen der Entwickler besser zur Behandlung numerisch aufwendiger Probleme geeignet. TOUGH ist nicht quelloffen konzipiert; Erweiterungen sind deshalb nicht für die Allgemeinheit zugänglich.

Bei der GRS ist TOUGH wie auch MARNIE2 seit den 90er Jahren kontinuierlich in einer eigenen Entwicklungsreihe (TOUGH2-GRS und TOUGH2-MP-GRS) weiterentwickelt worden. Seit November 2022 wird TOUGH2-GRS seitens des BASE genutzt und weiterentwickelt. Gleichzeitig besitzt das BASE eine Version von TOUGH3.

PFLOTRAN

PFLOTRAN wurde entwickelt, um mehrkomponentigen Multiphasenfluss (mit Wärmetransport) zusammen mit reaktivem Transport in einem porösen oder geklüfteten Medium zu beschreiben; es existiert außerdem die Kopplung an einen in der Entwicklung befindlichen Geomechanik-Teil, dem ein einfaches elastisches Stoffmodell zugrunde liegt. Die Systemdynamik wird durch Lösen des entsprechenden Systems allgemeiner partieller Differentialgleichungen beschrieben. Das Rechenprogramm ist darauf ausgelegt, massiv parallel arbeiten zu können und ist in der Lage sowohl auf High-Performance-Computing(HPC)-Infrastrukturen, als auch auf gewöhnlicher Arbeitsplatz-Infrastruktur zu rechnen (siehe z. B. *Lichtner u. a. (2020)*). Parallelisierung wird durch Einsatz der PETSc Bibliothek erreicht. PFLOTRAN ist komplett quelloffen und wird hauptsächlich an den Sandia National Laboratories (SNL) entwickelt.

FEHM

FEHM (*Zyvoloski 2007; LANL 2025*) wird zur Simulation von reaktivem Grundwasser- und Schadstofftransport in tiefen und flachen, geklüfteten und ungeklüfteten porösen Medien verwendet. Die Entwicklung von FEHM an den Los Alamos National Laboratories reicht bis in die frühen 1970er Jahren zurück. FEHM wurde u. a. in Forschungsarbeiten zum potentiellen Endlagerstandort Yucca Mountain eingesetzt und diente dort insbesondere dem Verständnis von Strömungsfeldern und Stofftransport in den gesättigten und ungesättigten Zonen unterhalb des potenziellen Endlagerstandorts. Aktuell wird FEHM in einer Vielzahl von Projekten für das US-Energieministerium (DOE) eingesetzt, darunter u. a. die Sanierung der Nevada Test Site, das LANL-Grundwasserschutzprogramm, die geologische CO₂-Sequestrierung, Programme zur Enhanced Geothermal Energy (EGS) und die Endlagerung radioaktiver Abfälle.

Die in FEHM verwendete numerische Methoden sind die Kontrollvolumenmethode (CV) für Strömungs- und Wärmegleichungen, wodurch FEHM die Energie- und Massenerhaltung exakt gewährleisten kann, und die Finite-Elemente-Methode (FE) für Verschiebungsgleichungen. Zusätzlich zu diesen Methoden steht eine Option zur Verwendung der FE-Methode für Strömungsgleichungen sowie ein einfaches Finite-Differenzen-Schema zur Verfügung.

3.2 Vergleich PFLOTTRAN/TOUGH

Im Folgenden werden die Rechenprogramme PFLOTTRAN und TOUGH3 einer vertiefenden Analyse unterzogen werden. Es findet eine Gegenüberstellung der grundsätzlichen Vor- und Nachteile der beiden Rechenprogramme statt. Die Analyse wird im Hinblick auf eine Erweiterung des Quellcodes und die Fehlerresilienz und Wartbarkeit der Rechenprogramme durchgeführt. Eine mögliche Erweiterung der beiden Rechenprogramme soll dabei insbesondere auf die bei der GRS entwickelten Teile des Programms TOUGH2-GRS hin analysiert werden (Navarro 2020). Das Ergebnis dieser Analyse führt dann zu einer begründeten Entscheidung für die Weiterentwicklung des Programms PFLOTTRAN unter Übertragung fehlender Modelle aus TOUGH2-GRS.

3.2.1 Allgemeine Leistungsmerkmale

PFLOTTRAN und TOUGH3 sind im Kap. 3.1 einführend beschrieben worden. Die allgemeinen Merkmale der Rechenprogramme sind in der Tab. 3-1 gegenübergestellt.

Tab. 3-1: Allgemeine Merkmale von TOUGH3 und PFLOTTRAN

	PFLOTTRAN	TOUGH3
TH	Zweiphasiger Fluss im porösen Medium; Transport Gl. separat	Zweiphasiger Fluss im porösen Medium; Transport gelöster Komponenten EOS-Modul spezifisch
M	Elastisches Materialmodell in Entwicklung, koppelt sequentiell an TH	nicht umgesetzt (alternativ: TOUGH-FLAC Kopplung)
C	Umfangreicher C Teil sequentiell an TH gekoppelt. Transport hier	nicht umgesetzt (alternativ: TOUGHREACT)
B	B-Modelle enthalten	in Module TMVOC, nicht gemeinsam mit EOS7R nutzbar
x-Diskr.	3D finite Volumen, kann auf unstrukturierten Gittern rechnen. Für die Mechanik Finite Elemente	3D IDFM, ausschliesslich strukturierte Gitter (Voronoi)
Solver	PetSc	PetSc

3.2.2 Spezifische Leistungsmerkmale

Im Folgenden werden kurz die spezifischen Leistungsmerkmale für die einzelnen Prozessklassen gegenübergestellt. TH bezeichnet dabei thermo-hydraulische, C chemische, M mechanische und B biologische Prozesse.

TH Prozesse

In der Tab. 3-2 sind die wesentlichen TH Prozess von PFLOTTRAN und TOUGH3 gegenübergestellt. Wo erforderlich, wird auf Besonderheiten der Implementierung eingegangen.

Tab. 3-2: Wesentliche TH Prozesse in TOUGH3 und PFLOTTRAN

Modell	PFLOTTRAN	TOUGH3
Flussgl.: Darcy	Mode GENERAL: Zweiphasiger (Gas/flüssig) Fluß der an das reaktive Transportmodell („C-Teil“) koppelt. Massen- und Energieerhaltungsgl. implementiert, in beiden steckt der Darcyfluß der Phasen. Relative Permeabilitäten und Kapillardruckkurven, Kelvingl. Für Dampfdruckerniedrigung.	zweiphasig umgesetzt (Basis aller EOS-Module, bis auf EOSg). Die verschiedenen EOS-Module berücksichtigen im Wesentlichen verschiedene Komponenten in den zwei Phasen und teils verschiedene Übergangsmechanismen zwischen den Phasen. Im Vergleich zu PFLOTTRAN muss das gewünschte EOS-Modul bei Erstellung des ausführbaren Programms ausgewählt werden. Die Zahl der Komponenten ist gegenüber PFLOTTRAN stark limitiert. Es gibt EOS-Module, die dreiphasige Rechnungen erlauben (Wasser, Gas, fl. CO ₂) ECO ₂ m
Flussgl.: Richards	implementiert (nicht mit Komponenten)	In EOSg umgesetzt

Tab. 3-2: Wesentliche TH Prozesse in TOUGH3 und PFLOTTRAN (Fortsetzung)

Modell	PFLOTTRAN	TOUGH3
Flussgl.: einph. Masse u. Energie	Sog. TH-Mode: Einphasige Massen und Energieerhaltungsgl.; Betrachtete Phase mit variabler Sättigung; Wärmeleitung zu por. Medium über parametrisierte Gl.; Eis und Wasserdampf über spezielle Form der Richards Gl., die an Energieerhaltung koppelt. TH kann sequentiell an C koppeln	Einphasige Grenzfälle sind in allen EOS-Modulen möglich. Eis als Phase nicht darstellbar (Ausnahme: TOUGH+, Weiterentwicklung von TOUGH2, aber nicht in TOUGH3 übernommen).
Flussgl.: Wasser mit überkriti- schen CO ₂	Sog. MPHASE-Mode: Zweiphasiges System aus Wasser und überkritischem CO ₂ mit Phasenübergängen und zwischen ein- und zweiphasigen Zuständen. Kann sequentiell an den C Teil koppeln. Interessant für Ölexploration im Untergrund (Fracking?)	In ECO2M enthalten, dort auch noch NaCl (in PFLOTTRAN über C-Kopplung möglich?)
Multipha- sendiffu- sion	Nicht vorhanden	Ansatz zu Multiphasendiffusion implementiert (nicht ausschließlich gewöhnliche Diffusion in den Phasen, sondern mit Wechselwirkungseffekten)
Trans- port von Kompo- nenten	Transportgl. im Mode GENERAL oder TH, gekoppelt an C-Teil, darüber auch Zerfall (beliebige Ketten); die zu den Komponenten gehörige Physik (Sorption, Lösung) findet sich im C-Teil	EOS7R: Mutter- Tochternuklid (mit Zerfall), andere EOS-Module; die Physik zu den RN ist im EOS-Modul enthalten.
Wärme- trans- port	Bis auf Richards-Mode implementiert. Mit Wärmeübergang Wirtsgestein, kein Temperaturfeld im Gestein	Über Energiefluss implementiert. Mit Wärmeübergang Wirtsgestein, kein Temperaturfeld im Gestein. Semi-analytische Ansätze für Übergang in Wirtsgestein (Vorteil im Aufwand).

Tab. 3-2: Wesentliche TH Prozesse in TOUGH3 und PFLOTRAN (Fortsetzung)

Modell	PFLOTRAN	TOUGH3
Kapillar-druck-kurven	van Genuchten und Brooks-Corey	Pickens, TRUST, Milly, Leverett, van Genuchten, linear, modified Brooks, modified van Genuchten, Funktionen mit Hysterese, Funktion für Dreiphasige Systeme
Relative Permeabilitäten	Mualem-van Genuchten, Mualem-Brooks-Corey, Mualem-linear, Burdine-van Genuchten, Burdine-Brooks-Corey und Burdine-linear	van Genuchten, Corey, Grant, linear, Fatt u. Klikoff, Verma, weiter Funktionen, u. a. auch mit Hysterese-Effekten, Funktionen für dreiphasig

C Prozesse

Chemische Prozesse sind im Rechenprogramm TOUGHREACT implementiert. Im Vordergrund steht hier der Vergleich zu TOUGH3, wo einige Prozesse, die in PFLOTRAN im Chemieteil zu finden sind, im Transportteil umgesetzt sind (z. B. Diffusion, die bei PFLOTRAN in den Transport- und nicht in den Flussgleichungen zu finden ist). Generell ist jedoch TOUGH3 nicht für geochemische Rechnungen geeignet und PFLOTRAN zeigt hier deutlich mehr Möglichkeiten. Insbesondere kann PFLOTRAN beliebige Zerfallsketten (mit abgeleiteten Isotopen) berücksichtigen, was gerade bei Endlagerfragen eine wichtige Anforderung ist, s. a. Kap. 9. Der Pitzer-Ansatz für hochsalinare Lösungen ist in PFLOTRAN nicht implementiert (ausschließlich Debye-Hückel), dies müsste implementiert werden (vermutlich mit Schnittstellen zu einer entsprechenden Datenbasis).

M Prozesse

In TOUGH3 sind keine mechanischen Prozesse implementiert. Für das Programm TOUGH2-GRS ist ein Kompaktionsmodell (erweiterter Stelte-Ansatz) implementiert (Navarro 2018). In PFLOTRAN ist ein elastisches geomechanisches Modell implementiert. Allerdings ist diese THM Kopplung derzeit im Entwicklungsstadium und es ließen sich einfache Benchmarkrechnungen aus dem Forschungsprojekt BenVaSim I (Lux u. a. 2021b) nicht reproduzieren, siehe auch Kapitel 5.3.1. Gleichwohl sind die prinzipiellen Datenstrukturen für eine THM Kopplung in PFLOTRAN angelegt und es

existiert eine Kopplung zwischen den Finitevolumengitter des THC Teils mit dem Finiteelementengitter des M Teils. Deshalb scheint es für die Codeentwicklung am BASE von Vorteil zu sein, den Fortschritt der Entwicklung in PFLOTTRAN weiter zu verfolgen und ggf. eigenständige Weiterentwicklung zu betreiben. Alternativ kann das Rechenprogramm FEHM verwendet werden, siehe auch Kapitel 5.3.2.

B Prozesse

In PFLOTTRAN sind im Modul WIPP Source Sink Process Model Zersetzungsreaktionen auf biologischer Basis für Zellulose, Plastik und Gummi implementiert. In TOUGH3 sind im EOS-Modul TMVOC biologisch getriebene Reaktionen implementiert. Allerdings kann dieses EOS-Modul nicht zusammen mit dem EOS7R Modul (radioaktiver Zerfall) genutzt werden.

3.2.3 Modelle in TOUGH2-GRS

In TOUGH2-GRS sind nach *Navarro (2020)* die Prozessmodule COMP, CORFL, CORRO, DEGRA, FISS, GCOMP, PRLIM und RN enthalten, die neue physikalische Prozesse beinhalten. Diese Prozessmodule sind in der Tab. 3-3 mit einer kurzen Beschreibung aufgelistet und es wird gezeigt, ob die zugrundeliegenden physikalischen Prozesse in den Rechenprogrammen TOUGH3 bzw. PFLOTTRAN vorhanden sind.

Tab. 3-3: Module in TOUGH2-GRS nach (*Navarro 2020*).

Modul TOUGH2- GRS	Beschreibung	TOUGH3	PFLOTTRAN
TH	Zweiphasiger Fluss im porösen Medium; Transport Gl. separat	Zweiphasiger Fluss im porösen Medium; Transport gelöster Komponenten EOS-Modul spezifisch	

Tab. 3-3: Module in TOUGH2-GRS nach (Navarro 2020). (Fortsetzung)

Modul TOUGH2- GRS	Beschreibung	TOUGH3	PFLOTRAN
COMP	Beschreibt die Kompaktion von mit Salzgrus verfüllten Strecken im Steinsalz. Bewirkt eine Hohlraumreduktion und damit eine Erhöhung des Porendrucks	nicht vorhanden	über den Umweg von Mineralausfällung (Rate muss bekannt sein, keine Rückkopplung an Druck)
CORFL	Korrosion von Abdichtbauwerken aufgrund korrosiver Flüssigkeiten (Änderung der Permeabilität)	nicht vorhanden	So nicht enthalten. Eventuell in Versionen abseits des Repo (aktuelle Forschung)
CORRO	Gasproduktion und Wasserverbrauch in Folge der Korrosion eisenhaltiger Behälter	nicht vorhanden	Im Modul WIPP Source Sink (Erzeugung von Laug und Gas enthalten). Erzeugung von H ₂ in Folge der Korrosion.
DEGRA	Lineare Änderung der Permeabilität über eine bestimmte Zeit. Simuliert die Änderung der Permeabilität technischer Barrieren (ohne Kenntnis der Prozessdetails!).	nicht vorhanden	Nicht vorhanden, kann aber zeitabhängig vorgegeben werden.
FISS	Gastransport durch mikroskopische Wegsamkeiten (Öffnung von Gaswegsamkeiten bei bestimmten Grenzdrücken, führt zu zusätzlichem Term in der Gastransportgl.)	nicht vorhanden	Nicht in der Form von TOUGH2-GRS. Eventuell über Dual Continuum Model, Forschungsarbeit zu Kristallin (DECOVALEX)

Tab. 3-3: Module in TOUGH2-GRS nach (Navarro 2020). (Fortsetzung)

Modul TOUGH2- GRS	Beschreibung	TOUGH3	PFLOTTRAN
GCOMP	Zusätzliche Eigenschaften der Hauptgaskomponenten (Molekulargewicht, spezifische Enthalpie, inverse Henry-Konstante, Viskosität Gas-Dampf Mischung)	nicht vorhanden, aber: EOS7CA, Mischung reales Gas, Luft, beschränkt auf CO ₂ , N ₂ , CH ₄	Eigenschaften der Komponenten können in der Datenbasis vorgegeben werden. Bei einer Gas-komponente auch im Mode GENERAL direkt.
PRLIM	Gasentweichen aus Modellgebieten	nicht vorhanden	nicht vorhanden
RELA	Zusätzliche Relationen für relative Permeabilitäten und Kapillardrücke	nicht vorhanden	nicht vorhanden
RN	Radionuklidmodul	nicht vorhanden	umgesetzt

3.2.4 Vergleich sonstiger Merkmale

Quellcode

PFLOTTRAN ist in objektorientiertem FORTRAN 2003 geschrieben. Damit ist der Quellcode programmiertechnisch auf dem aktuellsten Stand und nutzt viele Vorteile objektorientierter Programmierung (insbesondere Datenpolymorphismen) vorteilhaft aus. Die Lesbarkeit und Übersichtlichkeit dieser Art der Programmierung erfordern gegenüber traditionellen Weisen der FORTRAN Programmierung Übung. Die bisherigen Programmierarbeiten, siehe auch Kapitel 4.1 haben aber gezeigt, dass dies mit vertretbarem Aufwand möglich ist.

TOUGH3 ist in FORTRAN 95 geschrieben und deshalb nicht in gleicher Weise objektorientiert wie PFLOTTRAN. Den damit einhergehenden Nachteilen steht gegenüber, dass der Quellcode leichter lesbar und nachvollziehbar ist.

Umsetzbarkeit Einbau

Um den Aufwand für Quellcodeerweiterungen in PFLOTRAN abzuschätzen, wurden als klar abgegrenzte Aufgabe anisotrope Tortuositäten im Quellcode eingebaut. Eine detaillierte Beschreibung zusammen mit Testfällen zur Verifizierung findet sich in Kapitel 4.1. Im Ergebnis war diese Aufgabe zunächst mit größerem Aufwand verbunden, da die Struktur des Quellcodes zunächst verstanden werden musste. Im Quellcode selber sind wenige Kommentare zu finden, so dass häufig Funktionalitäten nicht leicht erkennbar sind. Allerdings wurde in regelmäßigen Videokonferenzen eine bereitwillige und ausführliche Unterstützung bei der Codeentwicklung durch die Hauptentwickler bei SNL geleistet. Dadurch konnte die Entwicklungsaufgabe erfolgreich umgesetzt werden und in den Hauptentwicklungspfad im zentralen Repository von SNL übernommen werden (*Pflotran 2026a; Eckel 2024*). Aus diesen Erfahrungen lässt sich ableiten, dass der weitere Einbau neuer Funktionalitäten in PFLOTRAN gut umsetzbar ist. Eventuell ist der Aufwand höher als bei TOUGH3.

Open-Source Gedanke

Nach den Ausführungen in Kapitel 2 sollen die im BASE entwickelten Rechenprogramme grundsätzlich open-source, also mit einem der Allgemeinheit zugänglichen Quellcode entwickelt werden. Die Idee einer grundsätzlich quelloffenen Entwicklung folgt dem Transparenzgebot des Standortauswahlverfahrens (StandAV). PFLOTRAN ist grundsätzlich quelloffen und passt damit unter diesem Aspekt optimal zu diesen Anforderungen. Bei TOUGH3 könnten nur Erweiterungen des BASE quelloffen gestaltet werden, für den kommerziellen TOUGH3 Code sind dann lizenzrechtliche Aspekte zu beachten. Letztlich wären die Erweiterungen für TOUGH3 dann zwar nachvollziehbar, allerdings kann ohne den Erwerb von TOUGH3 keine eigene Nachrechnung durch Interessengruppen erfolgen. Durch die Quelloffenheit von PFLOTRAN ist die Entwicklergemeinde größer und das BASE kann bei seinen zukünftigen Entwicklungen in PFLOTRAN vom Wissen anderer Entwickler direkt profitieren.

Parallelisierung

Beide Rechenprogramme nutzen die PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation) Bibliothek (*Satish Balay u. a. 2023*) und sind dadurch in der Lage auch zeitlich-räumlich ausgedehnte Modelle auf Großrechnern mit zufriedenstellendem Aufwand zu rechnen.

3.2.5 Schlussfolgerung

Zusammenfassend hat sich gezeigt, dass die Weiterentwicklung von PFLOTRAN gegenüber der Weiterentwicklung von TOUGH3 zu bevorzugen ist. PFLOTRAN hat den entscheidenden Vorteil, dass eine starke THC Kopplung besteht und dass sich beliebige Radionuklidketten rechnerisch darstellen lassen, siehe auch Kapitel 9. Außerdem besteht zumindest in Grundzügen eine THM Kopplung, so dass erwartet werden kann, dass perspektivisch THMC-Rechnungen mit PFLOTRAN möglich sind. Gleichzeitig weist PFLOTRAN den Vorteil auf, komplett quelloffen zu sein und passt damit optimal zum Transparenzgebot des BASE im Rahmen des StandAV. PFLOTRAN wird durch seine Quelloffenheit in einer größeren Entwicklergemeinschaft weiterentwickelt und es lässt sich hier gut vernetzt arbeiten.

Aus der Beschäftigung mit PFLOTRAN lässt sich erwarten, dass insgesamt weniger eigene Entwicklungsarbeit zu leisten ist. Einige der zentralen in TOUGH2-GRS implementierten Prozesse (wie z. B. das Radionuklidmodul) sind bereits in PFLOTRAN vorhanden. Damit werden sich die Arbeiten an PFLOTRAN auf eine Verifizierung des Programms fokussieren und wo notwendig kann eigene Weiterentwicklung am Quellcode umgesetzt werden (wie z. B. zur Übertragung des DEGRA-Moduls). Dadurch ist es dann ebenso wie bei MARNIE2 möglich, flexibel auf die Notwendigkeit zum Einbau neuer Prozesse reagieren zu können. Gleichwohl ist davon auszugehen, dass Weiterentwicklungsarbeiten in PFLOTRAN grundsätzlich aufwendiger als in MARNIE2 sind, da PFLOTRAN eben keine komplette Eigenentwicklung ist. Dafür steht auf der anderen Seite eine Teilhabe an den Ergebnissen der Entwicklergemeinschaft.

3.3 Potential FEHM

Das Programm FEHM wurde im Kapitel 5.2.1 getestet und mit den Programmen TOUGH-GRS und PFLOTRAN verglichen. Die Ergebnisse zu Radionuklidtransport mit Zerfallsberechnung und Adsorption zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Um die Eignung von FEHM für die Forschungs- und Bewertungsaufgaben des BASE abschließend bewerten zu können, wurden in Kapitel 5.3.2 noch Vergleiche zu einem analytisch lösbaaren HM-Problem umgesetzt. Hier zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung und im Gegensatz zu PFLOTRAN liessen sich die gewählten Fragestellungen erfolgreich bearbeiten. Wie auch im Fall von PFLOTRAN, lässt sich für FEHM erwarten, dass insgesamt weniger eigene Entwicklungsarbeit zu leisten ist. Einige der zentralen in TOUGH2-GRS implementierten Prozesse (wie z. B. das

Radionuklidmodul) sind bereits FEHM vorhanden. Damit werden sich die Arbeiten an FEHM ebenfalls auf eine Verifizierung des Programms fokussieren.

3.4 Festlegung zur künftigen Weiterentwicklung

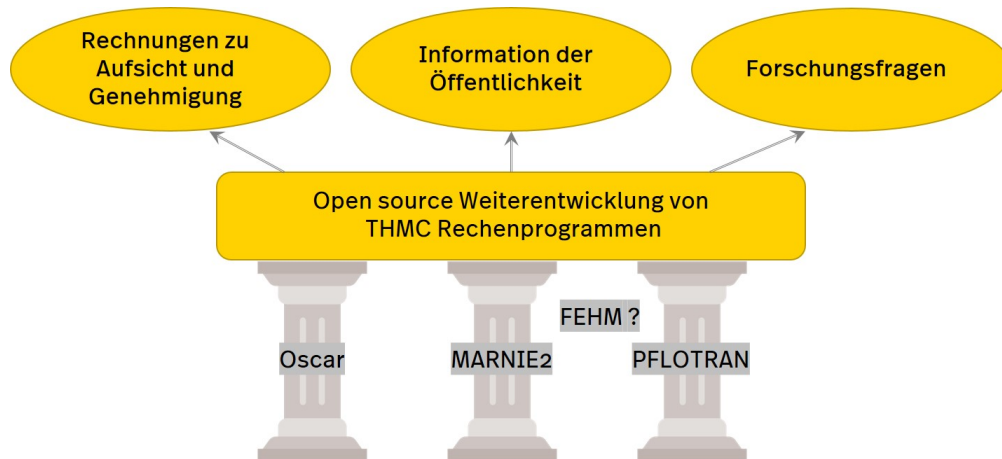


Abb. 3-1: Strategie zur Weiterentwicklung von Rechenprogrammen am BASE.

Aus den vorherigen Überlegungen lassen sich Festlegungen für eine Weiterentwicklung von Rechenprogrammen für den Bereich der Bewertung der Langzeitsicherheit der Endlagerung radioaktiver Abfälle aufstellen, die im Wesentlichen auf drei Säulen beruhen; zur Illustration siehe Abb. 3-1.

Die erste Säule bildet das Rechenprogramm Oskar als komplette Eigenentwicklung im BASE. Langfristiges Ziel ist es, für die meisten der für die vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen in der Standortauswahl relevanten THM Prozesse spezialisierte und qualitätsgesicherte Nutzerschnittstellen anzubieten und somit die Bewertungsmöglichkeiten potentieller Endlagerstandorte zu unterstützen. Ein weiteres Ziel ist die Dokumentation der für Sicherheitsbewertungen notwendigen physikalischen Prozessen für die Öffentlichkeit durch geeignete Dokumentationsformate. Oskar als Open-Source Projekt erlaubt der interessierten Öffentlichkeit die aktive Nachverfolgung der Arbeiten des BASE. Oskar ist als numerische Werkzeugsammlung eine langfristige Grundlage zur Lösung aktueller und kommender Fragestellungen, sowohl in der Forschungsabteilung als auch zur Unterstützung der Aufgaben anderer Fachabteilungen.

Als zweite Säule wird das Programm MARNIE2 als komplette Eigenentwicklung quelloffen weitergeführt. Ziel ist es, mittelfristig ein performantes Rechenprogramm

zu erhalten und weiterzuentwickeln, welches durch gut begründete Approximationen die Simulation kompletter Endlagerbergwerke ermöglicht. Zusammen mit systematischen Ungewissheits- und Sensitivitätsanalysen kann MARNIE2 neben aktuellen Forschungsfragen dann auch zur eigenständigen Prüfung der Vorschläge der Vorhabensträgerin im Standortauswahlverfahren eingesetzt werden. Ein wichtiges Entwicklungsziel für MARNIE2 besteht darin, das Programm an mehreren Stellen zu modernisieren. Dies betrifft z. B. ein zeitgemäßes Eingabeformat und die Möglichkeit zur Nutzung standardisierter Gitterformate. Durch diese Modernisierungen soll die Anwendbarkeit entscheidend verbessert werden.

Im Rahmen der dritten Säule der Entwicklungsstrategie soll die Weiterentwicklung von PFLOTRAN betrieben werden. Im Unterschied zur Weiterentwicklung von MARNIE 2 wird sich die Entwicklung auf die Erweiterung des Programms um endlagerrelevante Prozesse beschränken, die noch nicht in PFLOTRAN enthalten sind und auch auf Seiten der Hauptentwickler von SNL nicht zum Einbau vorgesehen sind. Damit werden die reinen Entwicklungsarbeiten mit kleinerem personellem Aufwand umsetzbar sein, als für MARNIE2. Im Gegensatz zu MARNIE2 ist PFLOTRAN durch seine massive Parallelität (Zeit- und Ortsdiskretisierung) gut als HPC Anwendung geeignet und kann für Fragestellungen genutzt werden, die über die approximativen und eindimensionalen Berechnungen von MARNIE2 hinausgehen.

Für das Programm FEHM ist zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht absehbar, zu welcher Säule eine Zuordnung stattfinden wird. Vorstellbar ist zum einen, dass FEHM wie auch PFLOTRAN im Rahmen der dritten Säule um endlagerrelevante Prozesse erweitert wird. Alternativ ist vorstellbar, dass FEHM im Rahmen der zweiten Säule um fehlende Prozesse aus MARNIE2 erweitert wird und dann MARNIE2 komplett ersetzt. Ein Vorteil von FEHM gegenüber MARNIE2 ist ein weiter fortgeschrittenes Pre- und Postprocessing, welches mit den Personalkapazitäten im BASE als Eigenentwicklung für MARNIE2 schwer umsetzbar erscheint.

Die Möglichkeit einer Kopplung geomechanischer Prozesse (M) an die TH(2)-Prozesse in den drei Säulen ist zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht geklärt. In PFLOTRAN besteht grundsätzlich die Möglichkeit zu gekoppelten TH2M Rechnungen, allerdings hat sich in den Arbeiten zum Benchmark BenVaSim gezeigt, dass diese Kopplung fehleranfällig ist (Kapitel 5.3.1). Für MARNIE2 besteht z. Zt. keine Kopplung an M-Prozesse. In Oskar ist eine THM Kopplung gut möglich (derzeit ohne zweiphasige Prozesse (H2)), und es ist mittelfristig angedacht, mechanische Prozesse für die Säulen 2 und 3 durch eine Kopplung an Oskar umzusetzen. Für FEHM sind THM Berechnungen nach *Kelkar u. a. (2014)* und den in Kapitel

5.3.2 gezeigten Arbeiten möglich. Sollten sich diese Möglichkeiten als tragfähig erweisen, so wäre eine Kopplung von M-Prozessen an TH(2)-Prozesse im Rahmen der Codeentwicklung beim BASE möglich.

Die drei Säulen zeigen ein hohes Maß an Diversifizierung bezüglich der zugrundeliegenden mathematischen Approximationsansätze, da sie mit der Finiten Elemente- (Oskar, FEHM), Finite Differenzen- (MARNIE2, FEHM) und Finite Volumen (PFLOTRAN, FEHM) Methode die meisten gängigen numerischen Modellierungsverfahren abdecken. Gerade im Hinblick auf die Qualitätsbewertung externer vorläufiger Sicherheitsuntersuchungen ist es unerlässlich, die Stärken und Schwächen der jeweiligen potentiell eingesetzten Verfahren genau zu kennen.

Mit den in den drei Säulen getroffenen Festlegungen wird in den nächsten Jahren im Fachgebiet F4 ein rechentechnisches Instrumentarium weiter wachsen, welches den Anforderungen an Transparenz und Nachvollziehbarkeit bei der Prüfung der Vorschläge der Vorhabensträgerin im Standortauswahlverfahren gerecht wird. Außerdem wird die Möglichkeit zu eigenständiger Forschung im Bereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle weiter gestärkt.

4 Weiterentwicklung von Rechenprogrammen

Jens Eckel

Die in Kap. 5 gezeigten Arbeiten zur Verifizierung der Rechenprogramme an neuen, zur Weiterentwicklung in Frage kommenden Rechenprogrammen waren aufwändiger und zeitintensiver als zum Zeitpunkt der Projektplanung angenommen. Durch die geleisteten Arbeiten wird es im Folgeprojekt ERLa 2 möglich, den Fokus stärker als bisher auf die Weiterentwicklung der Rechenprogramme um endlagerrelevante Prozesse zu legen.

4.1 PFLOTTRAN: Anisotrope Tortuositäten für diffusiven Transport

Um den zu erwartenden Aufwand bei der Weiterentwicklung des reaktiven Fluß- und Transportcodes PFLOTTRAN (eine kurze Beschreibung findet sich in Kap. 3.1) abschätzen zu können war es wichtig, die grundlegende Struktur des Quellcodes zu verstehen. Dazu sollte eine Weiterentwicklungsaufgabe gewählt werden, die einerseits hinsichtlich ihrer modelltechnischen Grundlagen übersichtlich ist, andererseits möglichst viele Teile des Quellcodes betrifft (wie z. B. Ein- und Ausgabe, Erweiterung der Datenstrukturen, gitterspezifische Elemente). Die Weiterentwicklungen fanden in einem eigens dazu geforkten Repository von PFLOTTRAN statt und wurden nach Abschluss der Arbeiten durch die Hauptentwickler der Sandia National Laboratories auf Konformität mit den Entwicklungsleitlinien von PFLOTTRAN geprüft und in das Repository übernommen. Seit August 2024 sind die durch das BASE beigesteuerten Entwicklungen Bestandteil von PFLOTTRAN V 6.0 (*Pflotran 2026a*).

Zur Weiterentwicklung wurde der Einbau anisotroper Tortuositäten gewählt. Diese dienen dazu, anisotropen diffusiven Transport, wie z.B. in der Nernst-Planck Gleichung, zu beschreiben. Der Prozess spielt beispielsweise eine Rolle in geschichtetem Ton und ist damit auch im Kontext der Endlagerung radioaktiver Abfälle von Relevanz (siehe *Rasouli u. a. (2015)* und die dort enthaltenen Referenzen (*Alt-Epping u. a. 2015; Appelo u. a. 2007; Appelo u. a. 2010*)).

Zur Einordnung der durch geführten Weiterentwicklung werden kurz die dafür relevanten Ausdrücke aus *Pflotran (2026c)* aufgeführt. Eine vertiefte Einordnung findet sich ebenda. Der Fluß Ω_j^α von Substanzen j in der Phase α wird in PFLOTTRAN durch den Ausdruck

$$\Omega_j^\alpha = (q_\alpha - \theta s_\alpha \mathbf{D}_\alpha \cdot \nabla) C_j^\alpha. \quad (4.1)$$

beschrieben. Hierbei sind q_α der Darcyfluß, θ die Porosität, s_α die Sättigung, C_j^α die Konzentration der Substanz und D_α der Dispersionstensor mit

$$D_\alpha = \tau D_m \mathbf{I} + a_T v \mathbf{I} + (a_L - a_T) \frac{v v}{v}. \quad (4.2)$$

Hier sind a_L , a_T die longitudinalen und transversalen Dispersionskoeffizienten, D_m der molekulare Diffusionskoeffizient und τ die Tortuosität. Die dimensionslose Tortuosität als Materialeigenschaft ist ein Maß für die Gewundenheit von Fließwegen in porösen Medien. In PFLOTTRAN wurde diese zuvor als isotrop angenommen und wurde im Rahmen der Entwicklungsarbeit so erweitert, dass anisotrope Materialeigenschaften berücksichtigt werden können. Es gilt jetzt

$$\tau = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & & \\ & \tau_{yy} & \\ & & \tau_{zz} \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

Ausserdiagonalelemente können nicht berücksichtigt werden. Der Quellcode kann aber bei Bedarf dahingehend mit geringem Aufwand erweitert werden.

Die technischen Details der Änderungen im Quellcode sollen hier nicht beschrieben werden und können bei Bedarf im Repository von PFLOTTRAN nachvollzogen werden (Eckel 2024). Der Einbau in den Quellcode war aufwändiger als zum Planungszeitpunkt des Projekts abschätzbar, da die zugrundeliegenden Datenstrukturen komplex sind und der Aufbau des notwendigen Verständnisses zeitintensiv ist. PFLOTTRAN ist in objektorientiertem FORTRAN 2003 geschrieben, was die Nachvollziehbarkeit der Programmabläufe im Quellcode, auch wegen kaum vorhandener Kommentierungen, schwierig gestaltet. Trotz der genannten Schwierigkeiten war es aber möglich, Dank der intensiven Beratung und Unterstützung von Hauptentwickler der Sandia National Laboratories (SNL) die Entwicklungsziele zu erreichen. Die gewonnenen Erfahrungen werden dabei unterstützen, zukünftige Weiterentwicklungen in PFLOTTRAN zu planen.

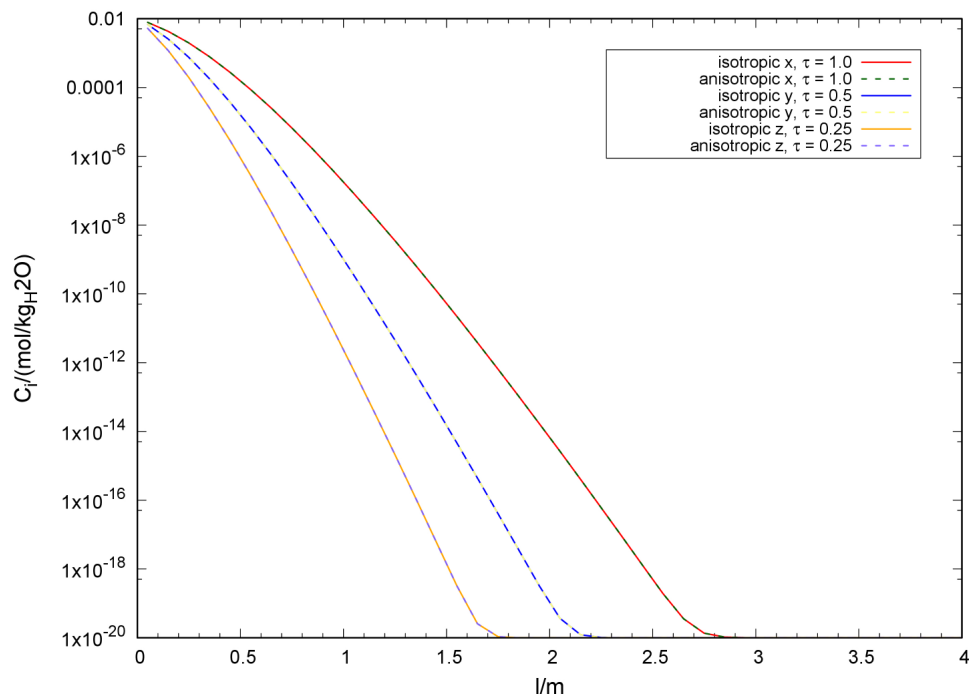


Abb. 4-1: Konzentration des Tracers über das Profil der Säule bei

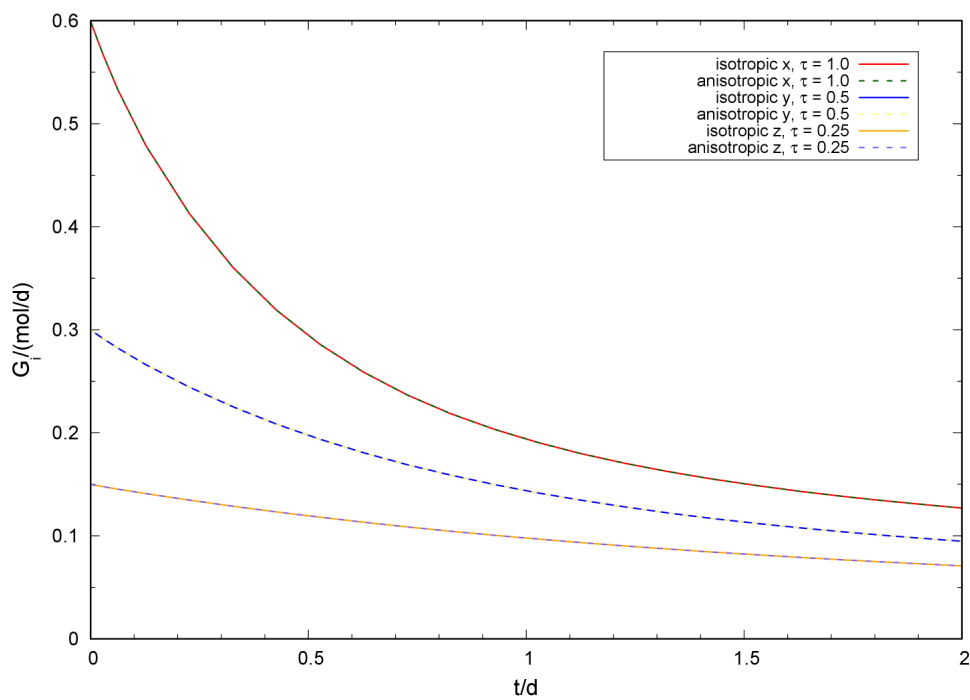


Abb. 4-2: Fluss des Tracers über den Konzentrationsrand der Säule.

Um die Korrektheit der Implementierung der Gl. (4.2) und (4.3) zu zeigen, wurden einfache Testfälle entwickelt, die auch als Vorlage für die entsprechenden Regres-

sionstests im Repository von PFLOTTRAN dienen (SNL 2024). Die Testfälle erlauben einen Vergleich der diffusiven Flüsse bzw. Tracerkonzentrationen zwischen isotroper und anisotroper Tortuosität. Dazu wird eine voll flüssiggesättigte Säule erstellt, wo an einem Rand eine feste Tracekonzentration von $C_i = 0,01 \text{ mol/kg}_{\text{H}_2\text{O}}$ vorgegeben ist, die Säule selber ist initial ohne Tracer. Der Tracer hat einen molekulare Diffusionskoeffizient $D_i = 1,157 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$. Die Säule ist in jedem der drei Testfälle ausschliesslich in x- y- oder z-Richtung diskretisiert. Für die anisotrope Tortuosität in Gl. (4.3) wird vorgegeben $\tau_{xx} = 1,0$; $\tau_{yy} = 0,5$; $\tau_{zz} = 0,25$ und für die Varianten mit isotroper Tortuosität wird τ jeweils auf die Werte der Einträge in τ gesetzt. Die Tracerkonzentration zu einem festen Zeitpunkt über das Säulenprofil und die zeitliche Entwicklung der diffusiven Flüsse am Rand der Säule müssen bei korrekter Implementierung exakt übereinander liegen; dies ist in den Abb. 4-1 bzw. 4-2 gezeigt.

4.2 MARNIE2: Lineare relative Permeabilitäten

Im Rahmen der durch das BMUKN geförderten Weiterentwicklung von Rechenprogrammen wurde das Rechenprogramm MARNIE zu einer zweiphasigen Version MARNIE2 erweitert (Navarro u. a. 2021; Navarro u. a. 2018a). Ein wesentlicher Bestandteil zweiphasigen Transports sind relative Permeabilitäten für die beteiligten Phasen, die deren Mobilität in Abhängigkeit von der jeweiligen Phasensättigung beschreiben. Die relativen Permeabilitäten $k_{r,i}$ gehen direkt in die in MARNIE2 implementierte Darcy-Gleichung ein (für eine genauere Einführung, siehe Navarro u. a. (2021))

$$\dot{G}_i = -\frac{\partial}{\partial x}(v_i G_i) - \frac{\partial}{\partial x}(p_i A_{\theta,i}) + \rho_i g_x A_{\theta,i} - \frac{G_i \mu_i \theta}{\rho_i k_{r,i} \gamma}. \quad (4.4)$$

Hierbei sind

$\dot{G}_i$	Massenstrom in der Phase i
v_i	Phasengeschwindigkeit
p_i	Druck in der Phase
g_x	Komponente der Erdbeschleunigung in Strömungsrichtung
μ_i	dynamische Viskosität des Fluids
ρ_i	Dichte des Fluids
$A_{\theta,i}$	Kontaktflächen der Phasen im Porenraum zwischen Gitterboxen
θ	Porosität
γ	Permeabilität

Um zweiphasigen Transport in einem porösen Medium adäquat beschreiben zu können, wird üblicherweise in der Darcygleichung (4.4) eine relative Permeabilität $k_{r,i}$

für die jeweilige Phase i eingeführt. Hierzu wird eine residuale Phasensättigung $S_{res,i}$ definiert. Sinkt die jeweilige Phasensättigung unter diese residuale Phasensättigung, wird die Phase immobil und es findet jeweils nur noch einphasiger Transport statt. Für das zugrundeliegende Konzept wird angenommen, dass die Permeabilität eine Funktion der Sättigung ist. Damit lässt sich die relative Permeabilität für die Phase i als dimensionslose Größe

$$k_{r,i} = \frac{k_i(S_i)}{k_{sat}} \quad (4.5)$$

mit der Permeabilität bei voller Phasensättigung k_{sat} und dem Wertebereich $0 \leq k_{r,i} \leq 1$ formulieren (Bear 2018). Dem Konzept liegt letztlich die Annahme zugrunde, dass das poröse Medium für die Phase mit der höheren Sättigung permeabler ist, da diese Phase mehr Porenvolumen ausfüllt als die Phase mit der niedrigeren Sättigung und somit mehr zum Transport beiträgt. Weiterführende Betrachtungen finden sich in (K. Li u. a. 2006; Bear 2018).

Für die relativen Permeabilitäten wurden in Navarro u. a. (2021) die Relationen nach van Genuchten, Corey, Grant und Fatt in MARNIE2 implementiert. Eine lineare Relation der Form

$$\begin{aligned} k_{r,l} &= \frac{S_l - S_{res,l}}{1 - S_{res,g} - S_{res,l}} \\ k_{r,g} &= 1 - k_{r,l} \end{aligned} \quad (4.6)$$

stand bislang nicht zur Verfügung und ist im Rahmen dieses Projekts implementiert worden. Dabei wurde die modulare Struktur des MARNIE2 Quellcodes ausgenutzt, die eine einfache Erweiterung zulässt.

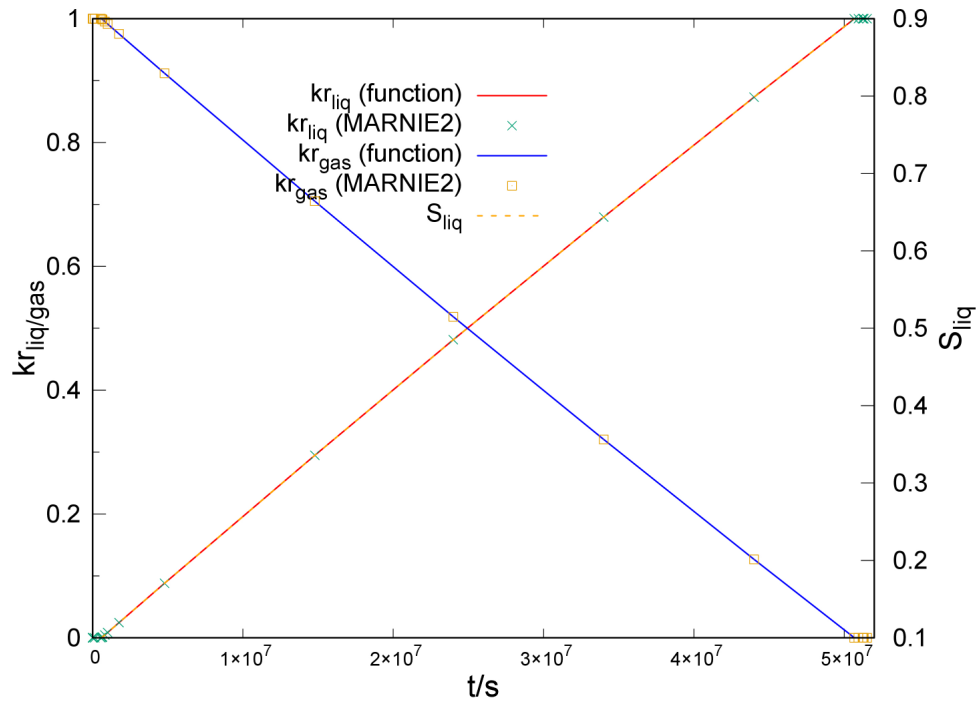


Abb. 4-3: Lineare Funktion für die relativen Permeabilitäten. Die Berechnung aus MARNIE2 ist im Vergleich zu Gl. 4.6 gezeigt

Um zu überprüfen, ob die Funktion für die relativen Permeabilitäten korrekt implementiert ist, wurde MARNIE2 in der Weise gestartet, dass die Phasensättigung S_l den vollen Bereich bis zur Sättigung durchläuft. Die in MARNIE2 berechnete relative Permeabilität wurde zusammen mit der relativen Permeabilitäten aus der Gl. (4.6) aufgetragen. Die Abb. 4-3 zeigt eine gute Übereinstimmung und die korrekte Implementierung der Funktion.

5 Verifizierung von Rechenprogrammen

Jens Eckel

Die Verifizierung von Rechenprogrammen ist eine der zentralen Aspekte des Inhouse-Forschungsprojekts ERLa. Aus den in Kapitel 2.2.2 näher ausgeführten Aspekten müssen Rechenprogramme, die zur Unterstützung von Aufsicht und Genehmigung eingesetzt werden insbesondere für Phänomene verifiziert sein, die für die Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen relevant sind und aus mehreren, sich teils überlagerten Einzelprozessen bestehen können. Dies ist bei den im Folgenden gezeigten Verifizierungsbeispielen der Fall.

Zusätzlich diene die eigene Verifizierung der im Kapitel 3 dargestellten Softwareplanung und der damit verbundenen Auswahl von weiterzuentwickelnden Rechenprogrammen. Die Programme PFLOTRAN und FEHM verfügen zwar über eigene Arbeiten zur Verifizierung, siehe *Dash u. a. (2015)* für FEHM und für PFLOTRAN in den jährlichen Berichten zur Weiterentwicklung des Programms (*Park u. a. 2024; Nole u. a. 2022*). Zusätzlich zu diesen existierenden Arbeiten ist es im Sinne der in Kapitel 2.3 beschriebenen Maßnahmen notwendig, eine eigene Auseinandersetzung mit der Verifizierung neuer Rechenprogramme umzusetzen.

5.1 Verifizierung für Radionuklidtransport mit Adsorption

Der advective und diffusive Transport gelöster Radionuklide in einem einphasigen Medium bei gleichzeitigem Zerfall der Radionuklide und Adsorption am durchströmten porösen Medium vereint mehrere Prozesse, die für die Bewertung der Langzeitsicherheit eines Endlagersystems von Bedeutung sind. Deshalb wird das im Folgenden beschriebene System mit seiner semi-analytischen Lösung zur Verifizierung verschiedener Rechenprogramme genutzt.

Das System besteht aus einer eindimensionalen flüssigkeitsgesättigten Strecke, die horizontal mit konstantem Fluss durchströmt wird. Die Strecke besteht aus einem porösen Medium. In der Flüssigkeit gelöste Komponenten werden durch geeignete Randbedingungen vorgegeben. Die analytische Lösung des Modells ist in *Genuchten (1985)* gezeigt worden und weitere Details zu den zugrundeliegenden Gleichungen und Randbedingungen können dort gefunden werden. Für ein besseres Verständnis werden im Weiteren die wichtigsten Gleichungen und Annahmen nach *Genuchten (1985)* zusammengefasst.

Das Modell beschreibt den Zerfall erster Ordnung einer Kette mit bis zu vier Gliedern in der Form



Der eindimensionale advektive und dispersive Transport der Kettenglieder unter stationären Bedingungen wird von einem Satz an gekoppelten Differentialgleichungen beschrieben

$$\partial_t(\theta c_1 + \rho s_1) = \partial_x(\theta D \partial_x c_1 - q c_1) - \mu_{w,1} \theta c_1 - \mu_{s,1} \rho s_1, \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\theta c_i + \rho s_i) = & \partial_x(\theta D \partial_x c_i - q c_i) - \mu_{w,i-1} \theta c_{i-1} - \mu_{s,i-1} \rho s_{i-1} \\ & - \mu_{w,1} \theta c_1 - \mu_{s,1} \rho s_1. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Hierbei ist c die Konzentration der Komponente in der Lösung, s die adsorbierte Komponentenkonzentration, q der Volumenfluß, D der Dispersionskoeffizient, θ die Porosität des porösen Mediums und x der Abstand. Das Subscript i bezeichnet das i -te Zerfallskettenglied und die Koeffizienten die Zerfallskonstanten für die Flüssigphase (Subscript w)- und Festphase (Subscript s). Für radioaktiven Zerfall wird angenommen, dass

$$\mu_{s,i} = \mu_{w,i}, \quad (5.4)$$

außerdem wird angenommen, dass es sich um ein vollständig homogenes poröses Medium handelt, in dem stationäre Flußbedingungen herrschen, d. h. θ und q sind konstant in Zeit und im Raum. Für die Konzentration der adsorbierten Komponenten, s_i , wird angenommen, dass diese über lineare Isotherme mit den Konzentrationen der Komponenten in der Flüssigkeit, c_i , verknüpft sind. Damit vereinfachen sich die Gl. (5.2) und (5.3) zu

$$R_1 \dot{c}_1 = D \partial_x^2 c_1 - v \partial_x c_1 - \mu_1 R_1 c_1 \quad (5.5)$$

und

$$R_i \dot{c}_i = D \partial_x^2 c_i - v \partial_x c_i - \mu_i R_i c_i + \mu_{i-1} R_{i-1} c_{i-1} \quad (i = 2, 3, 4) \quad (5.6)$$

wobei $v = \frac{q}{\theta}$ die durchschnittliche Porenwassergeschwindigkeit ist. Der Retardationsfaktor ist gegeben als

$$R_i = 1 + \frac{\rho k_i}{\theta}, \quad (5.7)$$

mit dem Sorptionskoeffizienten k_i . Die analytische Lösung in Genuchten (1985) wird

für semi-infinite Systeme ($0 \leq x < \infty$) mit der Randbedingung

$$\partial_x c_i(\infty, t) = 0, \quad t \geq 0 \quad (i = 1, 4) \quad (5.8)$$

und anfänglich frei von gelösten Komponenten

$$c_i(x, 0) = 0, \quad x \geq 0 \quad (5.9)$$

bestimmt und lautet für die Verteilung der Konzentration

$$c_i(x, t) = c_i^*(x, t). \quad (5.10)$$

Details zu den c_i^* finden sich in *Genuchten (1985)*, Appendix 1 und den dort enthaltenen Referenzen. Um die Ergebnisse der analytischen Lösung bestimmen zu können wurde das in *Genuchten (1985)* angegebene Rechenprogramm CHAIN im Rahmen von *Navarro u. a. (2018b)* reimplementiert und wurde für die im Folgenden gezeigten analytischen Ergebnisse verwendet.

5.2 Spezifischer Vergleich TOUGH3/PFLOTRAN: Testfall SAMR1

Der in Kapitel 3.2 beschriebene Vergleich wurde noch durch eine konkrete Verifizierungs- bzw. Vergleichsarbeit für TOUGH3 und PFLOTRAN erweitert. Für den Testfall SAMR1 besteht das Modellgebiet aus seiner 7 m langen, horizontalen und vollgesättigten Strecke. Die Strecke ist horizontal in 200 Gitterelemente gleichen Volumens unterteilt. Das Material der Strecke hat eine Porosität von $\theta = 0,3$ und eine Permeabilität $\gamma = 1,24 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2$. Es wird ein konstanter Fluss von $v = 0,1 \text{ m/d}$ angelegt, indem über die Strecke ein Druckgradient von $1,75 \text{ Pa}$ angelegt wird. Außerdem wird am einströmenden Rand eine konstante Konzentration des ersten Radionuklids von $C_{RN1} = 0,1 \text{ kg/kg}_{\text{H}_2\text{O}}$ vorgegeben. Die beiden Radionuklide haben eine Halbwertszeit von $\lambda_1 = 20 \text{ d}$ bzw. $\lambda_2 \rightarrow \infty$. Adsorption wird berücksichtigt, indem $R_{1,2} = 2$ in Gl. (5.7). Der diffusive Transport der Radionuklide wird bestimmt durch eine Diffusionskonstante $D = 1,162 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ und eine Tortuosität $\tau = 1$ für beide Radionuklide. Für TOUGH3 wird das System realisiert, indem am linken und rechten Rand der Säule ein inaktives Element angelegt wird, welches die entsprechenden Randbedingungen vorgibt. In PFLOTRAN können die Randbedingungen direkt vorgegeben werden.

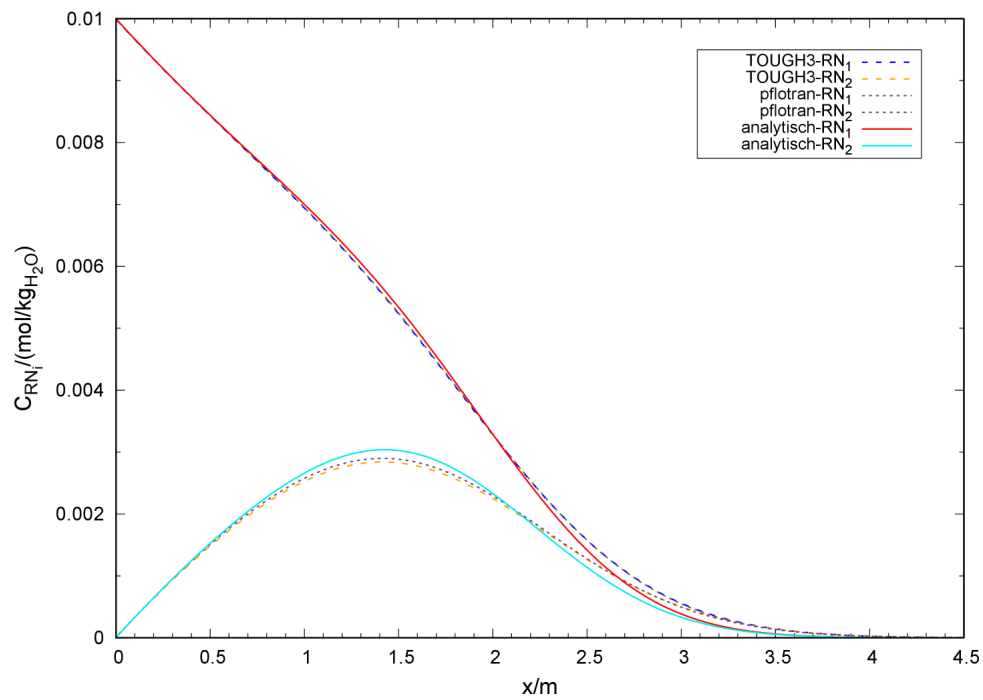


Abb. 5-1: Testfall SAMR1 für den Fall ohne Adsorption : Vergleich zwischen PFLOTRAN, TOUGH3 und analytischer Lösung.

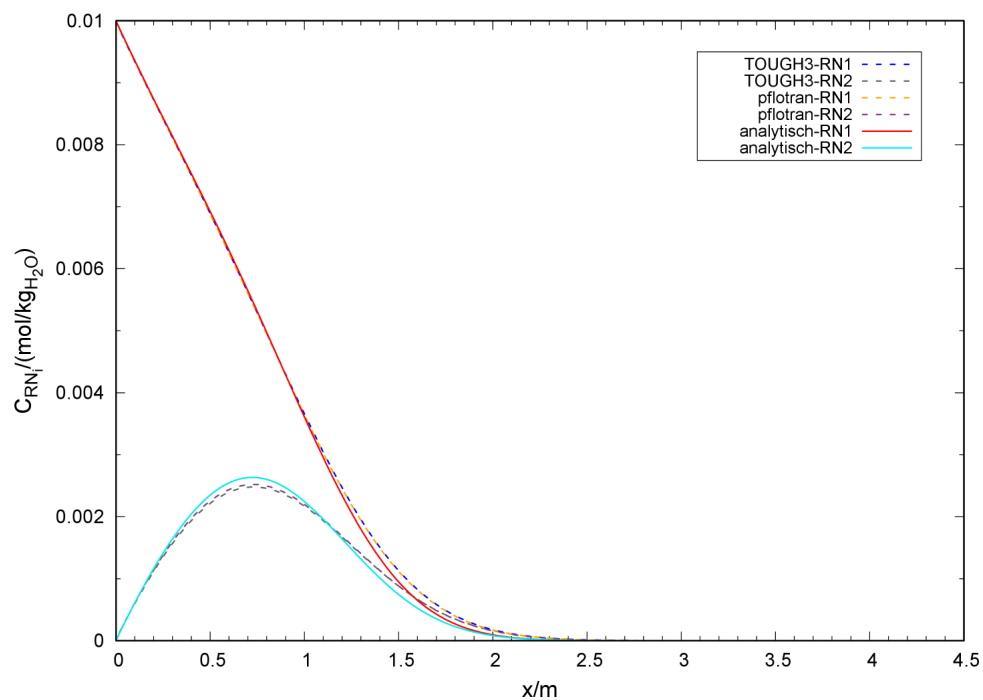


Abb. 5-2: Testfall SAMR1 für den Fall mit Adsorption : Vergleich zwischen PFLOTRAN, TOUGH3 und analytischer Lösung.

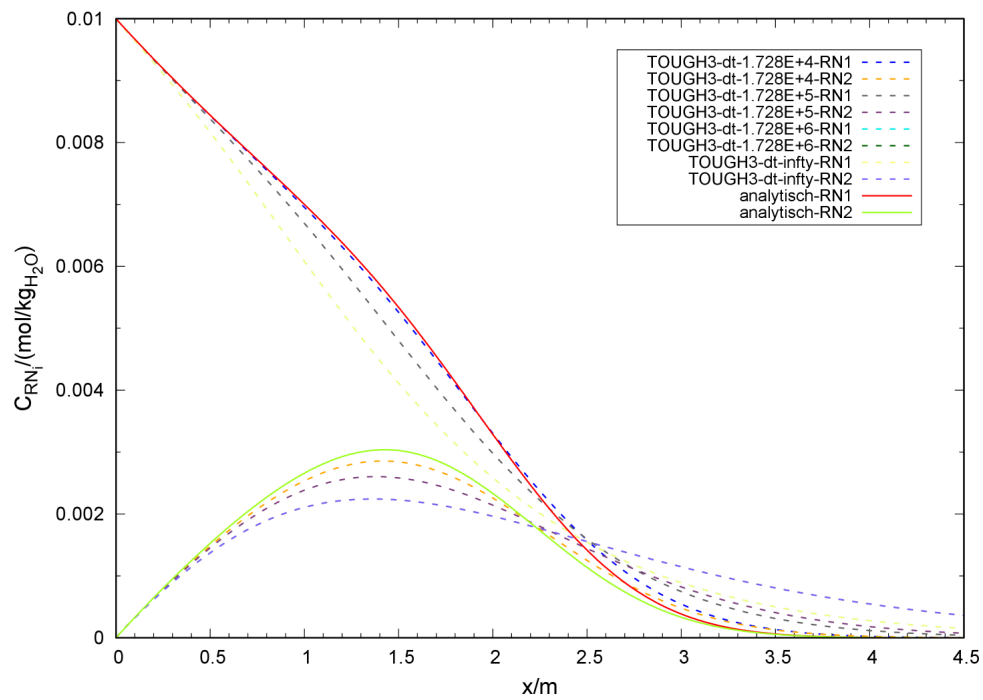


Abb. 5-3: Variation der maximal zulässigen Zeitschrittweite für TOUGH3. Gezeigt ist der Fall ohne Adsorption.

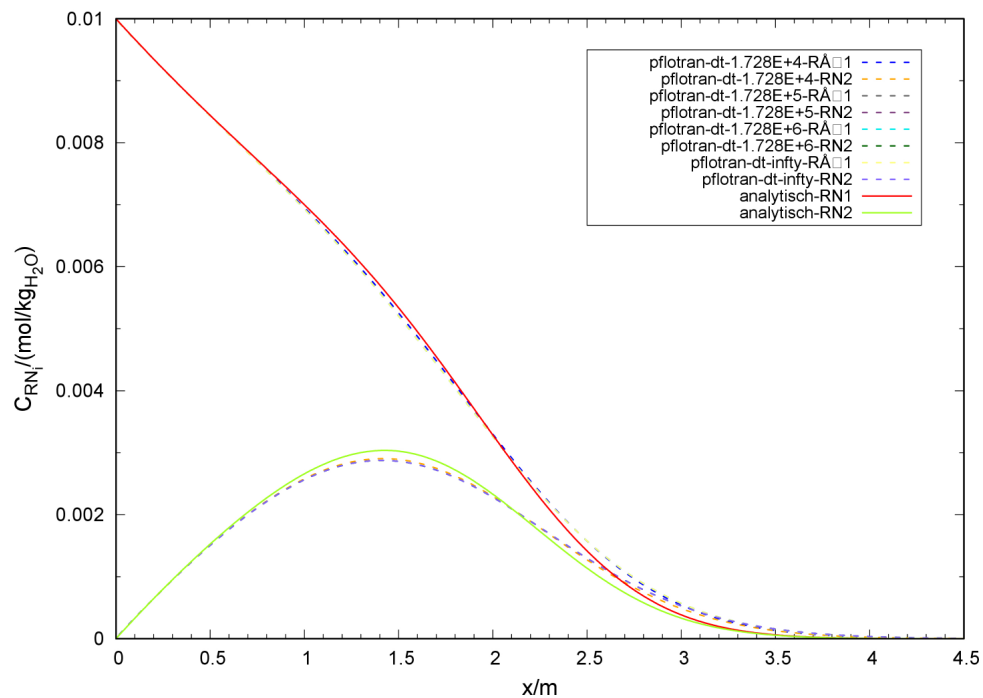


Abb. 5-4: Variation der maximal zulässigen Zeitschrittweite für PFLOTRAN. Gezeigt ist der Fall ohne Adsorption.

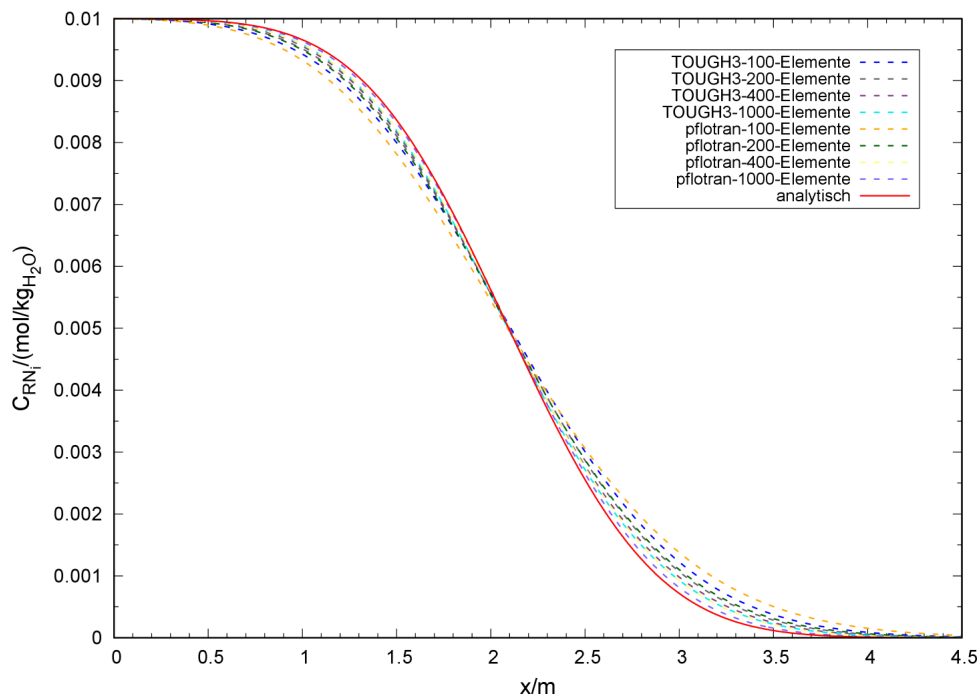


Abb. 5-5: Variation der räumlichen Diskretisierung entlang der horizontalen Ausrichtung des Systems für TOUGH3 und PFLOTRAN.

Die Abb. 5-1 und Abb. 5-2 zeigen den Vergleich zwischen der analytischen Lösung, TOUGH3 und PFLOTRAN für den Fall ohne bzw. mit Adsorption. Die Übereinstimmung ist insgesamt zufriedenstellend. Um mögliche Unterschiede zwischen TOUGH3 und PFLOTRAN bewerten zu können, wurde außerdem der Einfluss der Zeitdiskretisierung untersucht. Beide Rechenprogramme verfügen über eine adaptive Schrittweitensteuerung; die maximal mögliche Zeitschrittweite sowie die absolute und relative Genauigkeit werden zur Steuerung vorgegeben. In der Abb. 5-3 und der Abb. 5-4 sind die Vergleiche zur analytischen Lösung für TOUGH3 bzw. PFLOTRAN gezeigt. Es zeigt sich deutlich, dass der Einfluss dieser Eingabegröße auf das Ergebnis der Rechnung für PFLOTRAN sehr viel kleiner ist, als für TOUGH3. Die Zerfallsprozesse der Radionuklide scheinen in PFLOTRAN besser implementiert zu sein, als in TOUGH3. Die Problematik der Abhängigkeit der Ergebnisse von der maximal erlaubten Zeitschrittweite zeigte sich auch TOUGH2-GRS und war auch dort nicht zufriedenstellend. Insbesondere für Rechnungen, die eine lange Simulationszeit zusammen mit einer großen Anzahl an Gitterpunkten verbinden, kann die in TOUGH3 notwendige Beschränkung der maximal erlaubten Zeitschrittweite zu Problemen hinsichtlich der benötigten Rechenzeit führen.

Ein möglicher Einfluss der räumlichen Diskretisierung auf die Rechenergebnisse

wurde ebenfalls untersucht. In der Abb. 5-5 ist zu sehen, dass der Einfluss einer Variation der räumlichen Diskretisierung sehr viel kleiner ist, als die zuvor betrachtete Variation der Zeitdiskretisierung. Die Ergebnisse für PFLOTTRAN nähern sich mit steigender Gitterelementanzahl stärker an die analytische Lösung an, als die Ergebnisse für TOUGH3.

5.2.1 Testfälle für PFLOTTRAN und FEHM

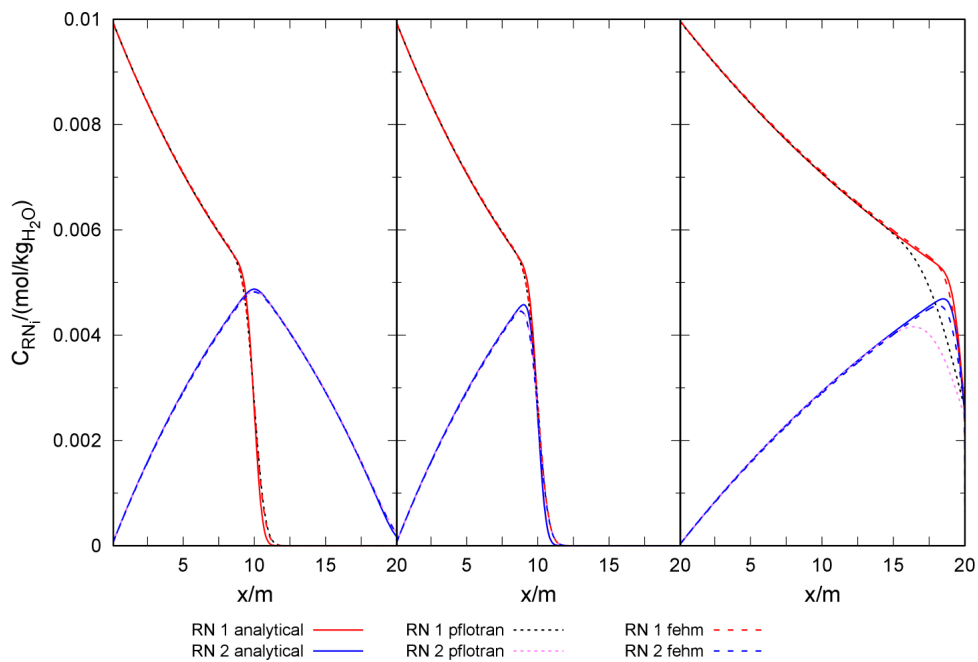


Abb. 5-6: Testfälle 1a, 1b und 1c (von links nach rechts) gemäß Tabelle 5-1 zum Vergleich von PFLOTTRAN und FEHM mit der semi-analytischen Lösung aus (Genuchten 1985).

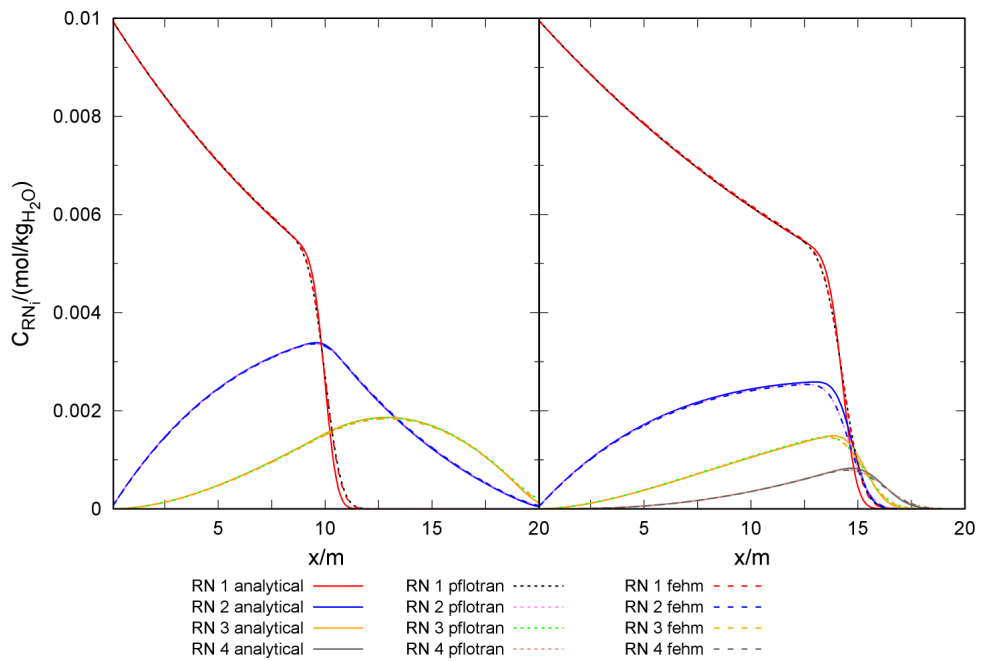


Abb. 5-7: Testfälle 2 (links) und 3a (rechts) gemäß Tabelle 5-1 zum Vergleich von PFLOTTRAN und FEHM mit der semi-analytischen Lösung aus (Genuchten 1985).

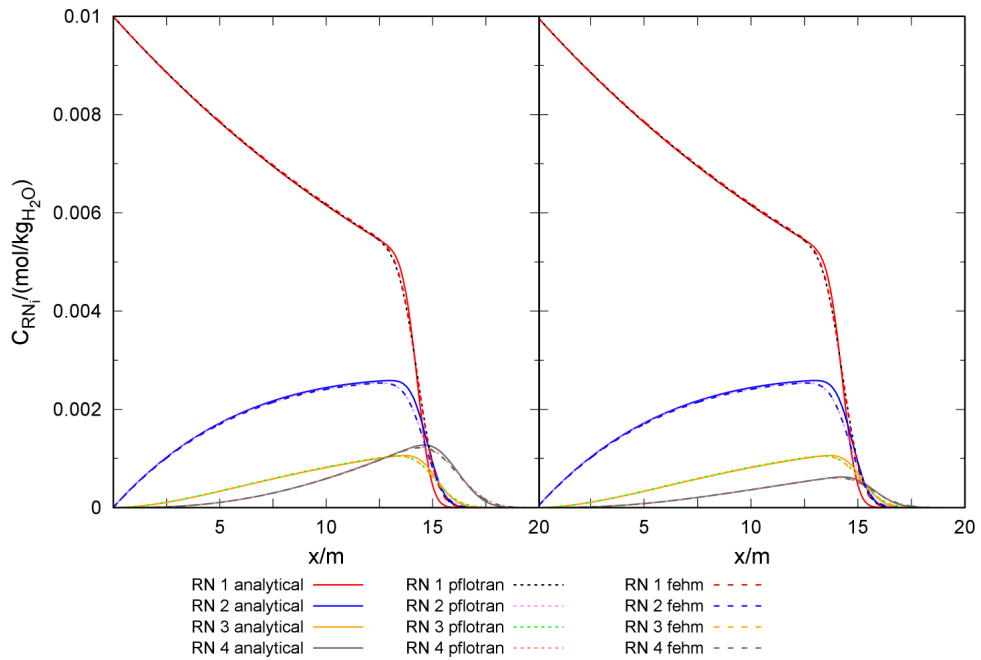


Abb. 5-8: Testfälle 3b (links) und 3c (rechts) gemäß Tabelle 5-1 zum Vergleich von PFLOTTRAN und FEHM mit der semi-analytischen Lösung aus (Genuchten 1985).

Im Gegensatz zu TOUGH3 lassen PFLOTTRAN und FEHM Rechnungen mit prinzipiell beliebig langen Nuklidketten zu. Die zuvor eingeführte analytische Lösung kann bis zu vier Kettenglieder berücksichtigen. Deshalb wurden verschiedene Testfälle entwickelt, deren sich unterscheidende Parameter in Tab. 5-1 zusammengefasst sind. Im Unterschied zum Testfall SAMR1 ist die horizontale und vollgesättigte Strecke 20 m lang (diskretisiert in 2000 Elemente) und es ist ebenfalls $\theta = 0,3$ und $\gamma = 1,24 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2$. Es wird ein konstanter advektiver Fluß von $v = 1,0 \text{ m/d}$ mit einer konstanten Konzentration von $C_{RN1} = 0.01 \text{ kg/kg}_{\text{H}_2\text{O}}$ am einströmenden Rand vorgegeben. Der diffusive Transport der Radionuklide wird bestimmt durch eine Diffusionskonstante $D = 0,01 \text{ m}^2/\text{d}$ und eine Tortuosität $\tau = 1$ für alle Radionuklide. Die Ergebnisse zum Zeitpunkt $t_0 = 20 \text{ d}$ in den Abb. 5-6 bis 5-8 zeigen eine gute Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen von PFLOTTRAN, FEHM und der analytischen Lösung, Gl. (5.10).

Tab. 5-1: Testfälle für PFLOTTRAN bzw. FEHM, denen die analytische Lösung aus (Genuchten 1985) zugrunde liegt.

Fall	Parameter
1a	$\lambda_1 = 20 \text{ d}; \lambda_2 \rightarrow \infty; R_1 = 2; R_2 = 1$
1b	$\lambda_1 = 20 \text{ d}; \lambda_2 \rightarrow \infty; R_1 = 2; R_2 = 2$
1c	$\lambda_1 = 20 \text{ d}; \lambda_2 \rightarrow \infty; R_1 = 1; R_2 = 1$
2	$\lambda_1 = 20 \text{ d}; \lambda_2 = 10 \text{ d}; \lambda_3 \rightarrow \infty; R_1 = 2; R_2 = 1; R_3 = 1$
3a	$\lambda_1 = 20 \text{ d}; \lambda_2 = \lambda_3 = 10 \text{ d}; \lambda_4 \rightarrow \infty; R_1 = 1,4; R_2 = 1,3; R_3 = 1,2; R_4 = 1,1$
3b	$\lambda_1 = 20 \text{ d}; \lambda_2 = 10 \text{ d}; \lambda_3 = 5 \text{ d}; \lambda_4 \rightarrow \infty; R_1 = 1,4; R_2 = 1,3; R_3 = 1,2; R_4 = 1,1$
3c	$\lambda_1 = 20 \text{ d}; \lambda_2 = 10 \text{ d}; \lambda_3 = 5 \text{ d}; \lambda_4 = 4 \text{ d}; R_1 = 1,4; R_2 = 1,3; R_3 = 1,2; R_4 = 1,1$

5.3 Verifizierung HM Kopplung

Entscheidend für die Adäquatheit von Sicherheitsuntersuchungen und Langzeitsicherheitsanalysen ist eine realitätsnahe Modellierung relevanter Prozesse und die geeignete Berücksichtigung der Wechselwirkungen dieser Prozesse untereinander. Dazu muss beispielsweise die Kopplung hydraulisch-mechanischer Prozesse in der Modellierung eines Endlagerstandortes durch Rechenprogramme so beschaffen sein, dass belastbare Aussagen zum Verhalten des Systems zusammen mit Ungewissheits- und Sensitivitätsbetrachtungen innerhalb vertretbarer Rechenzeiten möglich sind. In der Vergangenheit wurde dazu bei der GRS eine Kopplung der Rechenprogramme TOUGH2-GRS (Navarro 2018) mit FLAC3D (Itasca 2013) eingesetzt

(Navarro u. a. 2008). Diese Kopplung wurde unter anderem erfolgreich in der Teilnahme am Benchmark BenVaSim I (Lux u. a. 2021b) eingesetzt und wird auch von Lux u. a. (2015) genutzt.

Die einzelnen Rechenprogramme dieser Kopplungen wurden in den letzten Jahren weiterentwickelt, die Kopplung selbst findet über Dateiaustausch über einen Datenträger statt. Dieses Verfahren erweist sich als hochgradig kostspielig in der Rechenzeit und wird in der Modellierung der relevanten Prozesse eines möglichen Endlagersystems in Sicherheitsuntersuchungen oder im Langzeitsicherheitsnachweis bei den zu erwartenden Gittergrößen ein stark limitierender Faktor sein. Deshalb wurde im Rahmen der strategischen Neuausrichtung, s. a. Kapitel 2 und 3, der zu verwendenden und prioritär weiterzuentwickelnden Rechenprogramme eine Verifizierung der HM-Kopplung der Programme PFLOTRAN und FEHM durchgeführt. Die Arbeiten zu PFLOTRAN fanden im Rahmen der Teilnahme des BASE am Benchmark BenVaSim II statt und waren nicht erfolgreich, weshalb das Programm FEHM ebenfalls untersucht wurde.

5.3.1 Arbeiten zu PFLOTRAN

Im Rahmen des Inhouse-Forschungsprojekts BenVaBASE (Hotzel u. a. *in prep.*) war eine Teilnahme des BASE mit PFLOTRAN vorgesehen. Zur Zeit der Planung dieses Projekts wurde davon ausgegangen, dass PFLOTRAN grundsätzlich in der Lage ist einfache THM-gekoppelte Rechnungen umzusetzen. Um die grundsätzliche Eignung eigenständig zu überprüfen sollte zu Beginn des Projekts ein einfacher Benchmarkfall aus dem Projekt BenVaSim I reproduziert werden. Dieser Fall ist im folgenden Kapitel zu FEHM in den Gl. (5.15) ff. dargestellt.

Die Beschäftigung mit diesem Rechenfall hat gezeigt, dass PFLOTRAN nicht in der Lage ist, die Ergebnisse zu reproduzieren. Eine Verringerung der Porosität im Rechenfall brachte immerhin Rechenergebnisse zu Stande; diese sind aber weit von der entsprechenden semi-analytischen Lösung entfernt. Details hierzu finden sich im Abschlussbericht zu BenVaBase (Hotzel u. a. *in prep.*). Die genannten Probleme wurden ausführlich mit den Entwicklern von PFLOTRAN von den Sandia National Laboratories diskutiert. Hierbei wurde klar, dass die existierende THM-Kopplung in PFLOTRAN als „in Entwicklung“ bezeichnet werden muss und damit für die Zielsetzungen des BASE zunächst nicht von Interesse ist. Dies diente als Motivation, vergleichbare Arbeiten mit FEHM durchzuführen.

5.3.2 Arbeiten zu FEHM

Wie in Kapitel 5.3.1 ausgeführt, zeigte die existierende HM-Kopplung in PFLOTTRAN keine zufriedenstellenden Ergebnisse. Das Rechenprogramm FEHM (eine Einführung zu diesem Rechenprogramm findet sich in Kapitel 3 und den dort aufgeführten Referenzen) bietet ebenfalls die Möglichkeit für gekoppelte THM-Rechnungen. Eine detaillierte Beschreibung der Kopplung in FEHM, der zugrundeliegenden Gleichungen und einige Beispiele zu Verifizierung und Anwendung findet sich in (Kelkar u. a. 2014). Diese Ausführungen sollen in diesem Bericht nicht wiedergegeben werden und können bei Bedarf in Kelkar u. a. (2014) gefunden werden.

Um eigene Kompetenz bei Nutzung und Verifikation von FEHM aufzubauen wurde in einem ersten Schritt das in Kelkar u. a. (2014) gezeigte Beispiel zur Kopplung von Deformation und Porendruck nachgerechnet (Abschnitt 5.2 dort). In diesem Beispiel wird das transiente Kompaktionsbeispiel mit der Porosität als Funktion der angelegten Spannung betrachtet. Das System besteht aus einer horizontalen, 100 m langen vollgesättigten Säule in x -Richtung. Die rechte Seite der Säule erlaubt keinen Fluidfluss und ist fixiert in x -Richtung während auf der linken Seite eine Druckbelastung von 1 MPa in x -Richtung angelegt wird. Diese Druckbelastung führt zu einer Kompression der Säule und damit zu einer Verkleinerung des Porenraums, welche dann zu einem Austritt von Fluid auf der linken Seite führt. Die analytische Lösung für den Fluiddruck an der Position x zur Zeit t während dieses Prozesses ist gegeben durch Kelkar u. a. (2014)

$$p(x, t) = p_{l0} \left(\frac{4b}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-[\pi(2n+1)/2]^2 ct}}{2n+1} \sin \left(\frac{(2n+1)\pi x}{2L} \right) + 1 \right), \quad (5.11)$$

wobei

$$a \equiv \rho_0 \phi \beta_w E + \rho \alpha, \quad (5.12)$$

$$b \equiv \frac{\rho \alpha \sigma_l}{p_0 a} \quad (5.13)$$

und

$$c \equiv \frac{\rho \gamma E}{\mu a L^2}. \quad (5.14)$$

Hierbei sind

- α Porositätsrate in Abhängigkeit von der Spannung
- σ_l angelegte Druckbelastung
- p_{l0} initialer Fluiddruck
- β_w Kompressibilität des Fluids
- μ dynamische Viskosität des Fluids
- ρ Dichte des Fluids
- E Youngsches Modul des porösen Mediums
- β Biotkoeffizient
- γ Permeabilität
- L Länge der Säule

Tab. 5-2: Genutzte Parameter im transienten Kompaktionsbeispiel.

Parameter	Wert	Parameter	Wert
β_w	$4.4 \cdot 10^{-10} \text{ Pa}^{-1}$	E	10^{10} Pa
ρ	$990,0 \text{ kg/m}^3$	k	10^{-13} m^2
μ	$6,6 \cdot 10^{-4} \text{ Pa s}$	ϕ_0	0,1
α	0,1	σ_l	10^6 Pa
β	1,0	p_{l0}	10^5 Pa

Eine detaillierte Herleitung der Lösung in Gl. (5.11) mit den zugrundeliegenden Annahmen findet sich in (Kelkar u. a. 2014). Die analytische Lösung wurde in Python implementiert und es wurden die Parameter aus Kelkar u. a. (2014) verwendet, hier gezeigt in Tab. 5-2.

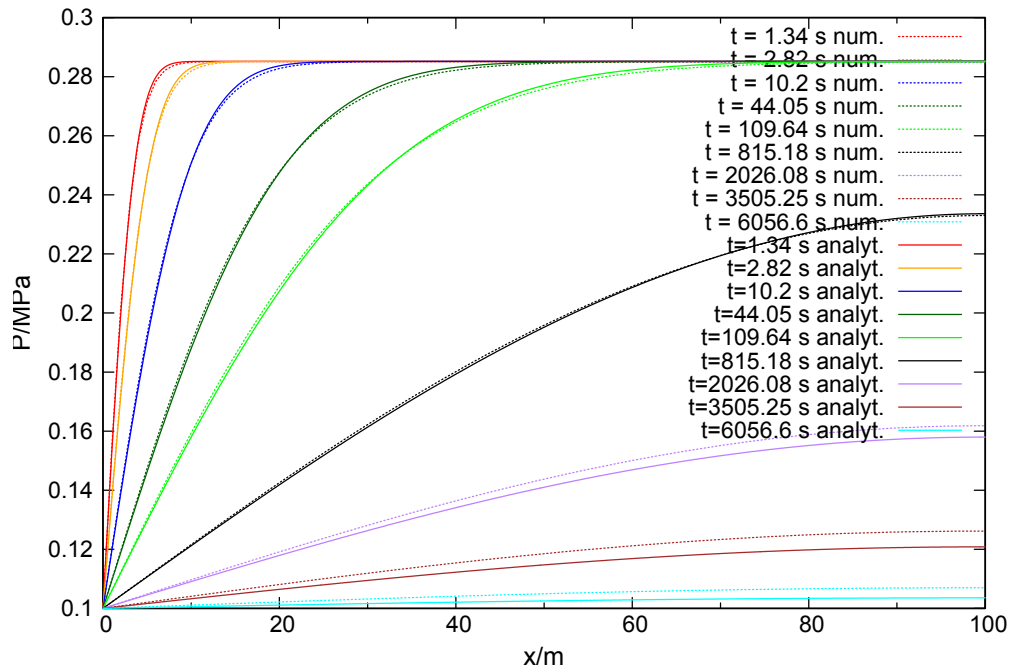


Abb. 5-9: Vergleich zwischen FEHM und der analytischen Lösung aus Gl. (5.11) für das transiente Kompaktionsbeispiel. Die durchgezogenen Linien gehören zur analytischen Lösung, die gepunkteten zu den FEHM-Ergebnissen. Auf der x-Achse ist der Abstand zum Ausflussrand auf der linken Seite des Modellsystems gezeigt.

Die in Abb. 5-9 gezeigten Ergebnisse zeigen eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen FEHM und der analytischen Lösung. Die gewählten Zeitpunkte sind minimal anders gewählt als in (Kelkar u. a. 2014). Trotz einiger Versuche die Einstellungen für den Löser zu optimieren, konnte die in Kelkar u. a. (2014) gezeigte bessere Übereinstimmung zwischen FEHM und der analytischen Lösung nicht reproduziert werden (Abbildung 3 dort). Für die eigene Überprüfung der Eignung von FEHM für gekoppelte HM Rechnungen ist die in Abb. 5-9 gezeigte Übereinstimmung aber zunächst ausreichend. Anhand des transienten Kompaktionsbeispiels wurde in Kelkar u. a. (2014) außerdem noch das Konvergenzverhalten von FEHM untersucht. Die Analyse des Logarithmus des numerischen Fehlers (L2-Norm), sowie das Stabilitätsverhalten in Abhängigkeit der Zeitschrittweiten zeigen gute Ergebnisse. Zu beachten ist, dass es bei FEHM für den Anwender nicht möglich ist, eine konstante Fluidkompressibilität und -viskosität vorzugeben. Die Viskosität wird standardmässig polynomial als Funktion von Temperatur und Druck an die NIST Datenbasis Haar u. a. (1984) gefittet. Um konstante Werte vorzugeben, wurden für die Rechenfälle kleinere Modifikationen am Quellcode vorgenommen.

Um die Eignung von FEHM an einem realitätsnäheren Beispiel zu untersuchen, wurde

zusätzlich zum zuvor beschriebenen System eine konstante Fluidströmung über die horizontale Säule angelegt. Dazu ist ein Ausstrom über die rechte Seite der Säule erlaubt und es wird zwischen linker und rechter Seite der Säule eine konstante Fluiddruckdifferenz angelegt. Eine semi-analytische Lösung für dieses System wird zusammen mit einer ausführlichen Herleitung in (Lux u. a. 2015; Lux u. a. 2021b) eingeführt und wurde für den Benchmark BenVaSim I genutzt (Lux u. a. 2021a). Das Anlegen der linksseitigen Kraft führt zu einer Kompaktion des zur Verfügung stehenden Porenraums und es kommt zu einer instantanen und undrainierten Erhöhung des Porendrucks, beschrieben durch den Ausdruck (Lux u. a. 2021b)

$$p_l^{inst} = p_{l0} + \frac{\beta M_l}{E + \beta^2 M_l} \Delta \sigma_{tot}. \quad (5.15)$$

Die transiente Entwicklung des Porenwasserdrucks folgt dann

$$p_l(t; x) = p_{l,links} + c_0 \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4at}} \right) + \sum_{i=1}^{\infty} c_i \left[\operatorname{erf} \left(\frac{i \cdot L + x}{\sqrt{4at}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{i \cdot L - x}{\sqrt{4at}} \right) \right] \quad (5.16)$$

mit

$$a \equiv \frac{k_l E M_l}{E + \beta^2 M_l}, \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} c_i &= p_{l0} - p_l^{inst} && \text{für gerades } i, \\ c_i &= p_l^{inst} - p_{l,links} && \text{für ungerades } i, \end{aligned} \quad (5.18)$$

und der Gaußschen Fehlerfunktion

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi. \quad (5.19)$$

In den Gl. (5.15) bis (5.18) sind zusätzlich zu den Größen in den Gl. (5.11) bis (5.14)

p_l	Porenfluiddruck mit Anfangswert P_{l0}
M_l	Biot Modul des Fluids
$\Delta \sigma_{tot}$	Änderung der angelegten Spannung
k_l	Mobilität des Porenfluids $k_l = \frac{\gamma}{\mu \phi}$

Für den Vergleich mit FEHM wird zunächst eine komplett undrainierte Säule betrachtet, um den Vergleich zur instantanen Erhöhung des Porendrucks, Gl. (5.15), zu betrachten. Mit den in Tabelle 5-2 gezeigten Werten ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung zum identischen Wert für FEHM und Gl. (5.15) zu $p_l^{inst} = 0,2852 \text{ MPa}$.

Die dynamische Situation wird hergestellt, in dem die Säule beidseitig drainiert ist und für den Fluiddruck die Randbedingungen $p_{l,links} = 1 \text{ MPa}$ und $p_{l,rechts} = 0,1 \text{ MPa}$ über die Zeit konstant vorgegeben werden. In der Arbeit mit FEHM hat sich gezeigt, dass die beidseitig drainierte Situation zu Beginn der Simulation dem Aufbau von p_t^{inst} entgegensteht, da durch die drainierten Randbedingungen sofort ein Fluidfluss über die Säule induziert wird, bevor die Verkleinerung des Porenraums und die dadurch bedingte Erhöhung des Fluiddrucks ein Erreichen von p_t^{inst} möglich macht. Dies liegt darin begründet, dass mit der vorliegenden Version von FEHM nur eine sequentielle Kopplung zwischen dem hydraulischen Teil des Programms und dem mechanischen Teil des Programms möglich ist. Die Option einer vollständigen Kopplung erwies sich als nicht lauffähig und soll Gegenstand zukünftiger Entwicklungsarbeiten sein.

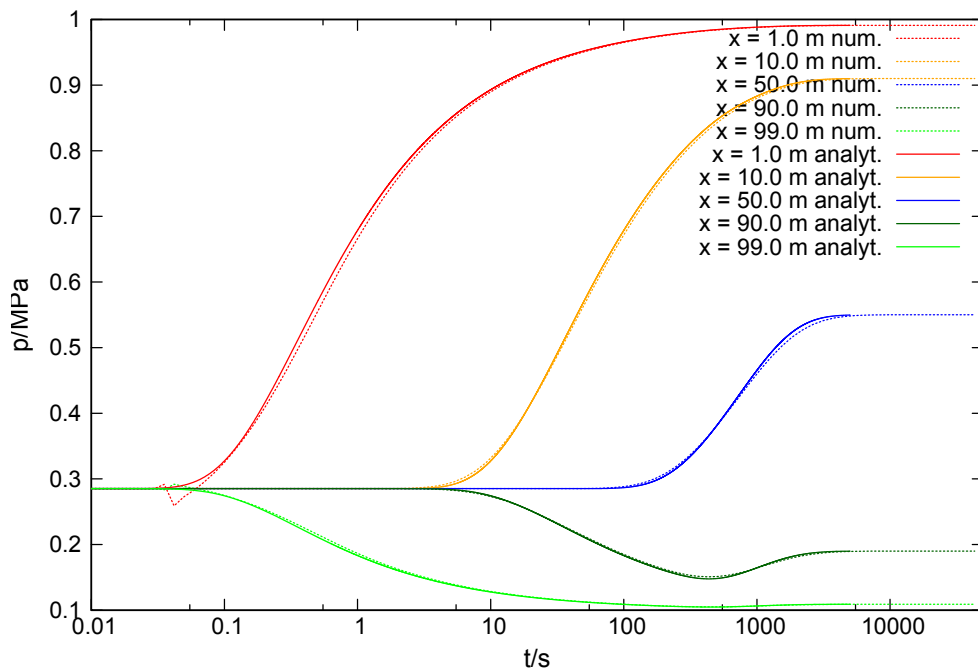


Abb. 5-10: Vergleich zwischen FEHM und der analytischen Lösung aus Gl. (5.16) für das drainierte Kompaktionsbeispiel. Die durchgezogenen Linien gehören zur analytischen Lösung, die gepunkteten zu den FEHM-Ergebnissen. Die zeitlichen Verläufe des Drucks sind an verschiedenen Beobachtungspunkten im System dargestellt.

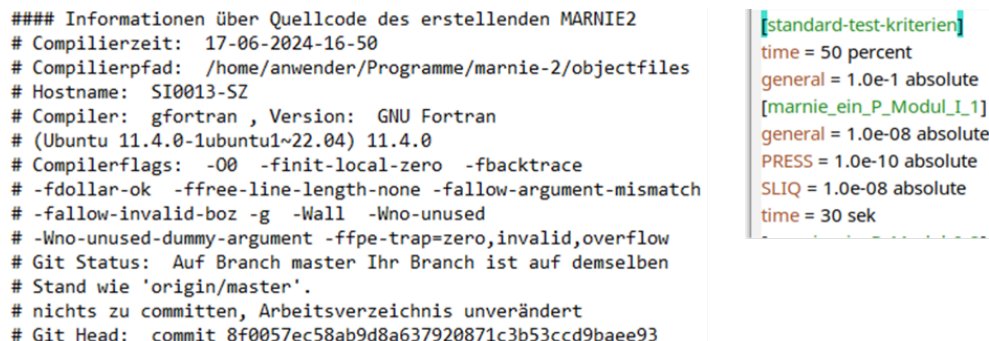
Um trotzdem einen Vergleich zu Gl. (5.16) herzustellen, wurden undrainierte Randbedingungen gewählt, und es wurde danach auf die drainierten Randbedingungen gewechselt. Die Ergebnisse der Rechnung sind in Abb. 5-10 gezeigt und es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Semianalytik und Numerik. Auch wenn der beschriebene Wechsel der Randbedingungen nur einen Behelf darstellt,

zeigt sich, dass die grundlegenden Prozesse für eine HM-Kopplung in FEHM nach eigener Prüfung korrekt implementiert sind. Wenn die volle Kopplung zwischen H und M Prozessen zukünftig lauffähig ist, sollte das beschriebene Beispiel ohne einen Wechsel der Randbedingungen die Ergebnisse der Gl. (5.16) reproduzieren können. Diese Kopplung kann Thema des Nachfolgeprojekts ERLa 2 werden.

5.4 Automatisierte Regressionstests für MARNIE2

Das Rechenprogramm MARNIE zusammen mit seiner Historie ist in Kap. 3.1 und den dort aufgeführten Referenzen beschrieben. MARNIE2 ist die daraus hervorgegangene zweiphasige Version (Flüssig- und Gasphase), die momentan weiterentwickelt wird und mittelfristig einsetzbar sein soll. Obwohl das Programm MARNIE seit den 90er Jahren eine lange Entwicklungs- und Anwendungshistorie aufweist, sind bisher keine Arbeiten unternommen worden, die die Verifizierung des Programms im Hinblick auf möglicherweise unbeabsichtigte Änderungen durch Weiterentwicklungen am Quellcode zeigen.

Die in *Navarro u. a. (2021)* entwickelten Plausibilitätstestfälle für Phasenwechsel, Kapillardruckkurven und relative Permeabilitäten für MARNIE2 wurden zum Anlass genommen ein System für Regressionstests für MARNIE2 zu entwickeln. Ziel war es dabei, ein System aufzubauen, im folgenden Testscript genannt, welches mit geringem Aufwand erweitert werden kann und gleichzeitig vollständig nachvollziehbar mögliche Änderungen aufzeigt. Das Testscript unterscheidet sich von vorher entwickelten Systemen wie SITA *Navarro u. a. (2015)*, da kein graphischer Vergleich der Ergebnisse stattfindet, sondern ein direkter Vergleich der Zahlenwerte auf Basis einer vorgegebenen Toleranz. Das entwickelte Testscript orientiert sich an dem Script welches den Regressionstests für PFLOTTRAN zugrunde liegt (SNL 2025).



```
#### Informationen über Quellcode des erstellenden MARNIE2
# Compilierzeit: 17-06-2024-16-50
# Compilierpfad: /home/anwender/Programme/marnie-2/objectfiles
# Hostname: SI0013-SZ
# Compiler: gfortran , Version: GNU Fortran
# (Ubuntu 11.4.0-1ubuntu1~22.04) 11.4.0
# Compilerflags: -O0 -finit-local-zero -fbacktrace
# -fdollar-ok -ffree-line-length-none -fallow-argument-mismatch
# -fallow-invalid-boz -g -Wall -Wno-unused
# -Wno-unused-dummy-argument -ffpe-trap=zero,invalid,overflow
# Git Status: Auf Branch master Ihr Branch ist auf demselben
# Stand wie 'origin/master'.
# nichts zu committen, Arbeitsverzeichnis unverändert
# Git Head: commit 8f0057ec58ab9d8a637920871c3b53ccd9baee93
```

```
[standard-test-kriterien]
time = 50 percent
general = 1.0e-1 absolute
[marnie_ein_P_Modul_I_1]
general = 1.0e-08 absolute
PRESS = 1.0e-10 absolute
SLIQ = 1.0e-08 absolute
time = 30 sek
```

Abb. 5-11: Angabe zur erzeugenden MARNIE2-Version in der Referenzdatei (links), sowie beispielhafte Konfigurationsdatei (rechts).

Das Testscript ist in Python geschrieben und auf die spezifischen Besonderheiten von MARNIE2 hin angepasst. Für einen Vergleich muss zunächst eine Referenzdatei für jeden Testfall erzeugt werden. Diese Referenzdatei wird mit einer spezifischen Option durch das Testscript erzeugt und enthält neben den Ergebnissen die Angabe zu Compiler, Compilerversion und Compileroptionen mit denen das ausführbare Rechenprogramm erzeugt wurde. Zusätzlich wird die Version des im Gitrepository abgelegten Quellcodes von MARNIE2 sowie das Betriebssystem auf dem die Ergebnisse erzeugt wurden mit angegeben, beispielhaft in Abb. 5-11 gezeigt. Dadurch ist bei späterem Vergleich mit einer Referenzdatei und eventuellen Abweichungen möglich, diese Aspekte in die Ursachensuche mit einzubeziehen.

Jeder Testfall, der durch das Testscript ausgeführt wird, folgt einer Konfigurationsdatei, in der die im Ergebnis des Testfalls aufgeführten Parameter mit Werten belegt können. Dies gilt auch bei der Erstellung einer Referenzdatei durch das Testscript. Ein Beispiel für eine Konfigurationsdatei findet sich in Abb. 5-11.

Das Testscript wird dann in Python ausgeführt und ruft die entsprechende Konfigurationsdatei auf. Folgende Optionen stehen bei Aufruf des Testscripts zur Verfügung:

- executable Pfad zum ausführbaren Programm
- config-files Testkonfigurationsdatei(en) zur Nutzung
- goldfiles Erzeuge neue Referenzdateien und überschreibe alte Dateien

Nach der Ausführung des Testscripts steht eine Logdatei zur Verfügung, welches Informationen zur für den Test genutzten MARNIE-Version, analog zu den Angaben in der Referenzdatei, enthält. Außerdem sind Angaben zum aktuellen Testlauf enthalten und bei Abweichungen zur Referenzdatei außerhalb der vorgegebenen Toleranz wird eine Fehlermeldung ausgegeben. Ein Beispiel ist in Abb. 5-12 gezeigt. Das Pythonscript für die Regressionstests kann zukünftig in die git-Umgebung mit eingebunden werden, so dass bei Einspielen einer Änderung in das Repository automatisiert die Regressionstests über das Pythonscript vorgenommen werden.

```

MARNIE2 Regressionstest Logdatei
Datum: 04-02-2026-11-26
Betriebssystem : linux
Testverzeichnis :
    /home/jeckel/Programme/marnie-2-testfaelle/regressionstests

MARNIE2 Quellcode repo Status:
-----
$ git status -u no
Auf Branch master
Ihr Branch ist auf demselben Stand wie 'origin/master'.

nichts zu committen, Arbeitsverzeichnis unverändert

$ git log -1 HEAD
commit 63209d9926ee6c3b0ce366ca3a839a61e3f5d0a0
Author: Jens Eckel <jens.eckel@base.bund.de>
Date: Tue Aug 19 14:47:01 2025 +0200

    Change Encoding to UTF-8.

Starte Testfälle
-----

Test: marnie_ein_P_Modul_I_1
Aufruf /home/jeckel/Programme/marnie-2/bin/marnie2-debug-gfortran marnie_ein_P_Modul_I_1
./modummy ./konvfebmin run_marnie_ein_P_Modul_I_1
Testlauf erfolgreich

Test: marnie_ein_P_Modul_I_2
Aufruf /home/jeckel/Programme/marnie-2/bin/marnie2-debug-gfortran marnie_ein_P_Modul_I_2
./modummy ./konvfebmin run_marnie_ein_P_Modul_I_2
Testlauf erfolgreich

Auslesen der Ergebnisse
-----

Test: marnie_ein_P_Modul_I_1

Test: marnie_ein_P_Modul_I_2

Vergleich zwischen Testfall und Referenzdaten
-----

Testfall marnie_ein_P_Modul_I_1
Keine Abweichungen zwischen Testergebnissen und Referenzdaten.

Testfall marnie_ein_P_Modul_I_2
Fehler: Toleranz für Variable PRESS verletzt.
Abweichungen zwischen Testergebnissen und Referenzdaten. Überprüfung erforderlich!

```

Abb. 5-12: Beispiel für eine Logdatei als Ergebnis eines Regressionstests für MARNIE2.

6 Pre- und Postprocessing

Gerd Frieling

Zur Erstellung von Rechenmodellen eines Endlagerbergwerks z. B. für die vorläufigen Sicherheitsanalysen im Zuge des Standortauswahlverfahrens gemäß StandAG, ist die Erstellung einer räumlichen Modellgeometrie und eine nachfolgende Vernetzung (Modellgitter), ein essentieller Schritt. Im Inhouse-Forschungsprojekt ERLa wurde für die Erstellung des Modellgitters für PFLOTTRAN und TOUGH2-GRS das Programm SALOME verwendet (CEA 2019).

Für PFLOTTRAN gibt es in SALOME ein Python-Plugin, welches u. a. die Prüfung und den Export von PFLOTTRAN-Modellgittern ermöglicht. PFLOTTRAN generiert zudem während des Rechenlaufes automatisch Ausgabedateien, die z. B. in ParaView eingelesen und dargestellt werden können. Somit ist für PFLOTTRAN bereits ein generelles Pre- und Postprocessing möglich. Es lag somit nahe für TOUGH2-GRS die gleichen Programme zu verwenden, um einen einheitlichen Workflow zu generieren.

Die Erstellung bzw. Optimierung des Pre- und Postprocessings insbesondere für TOUGH2-GRS baute auf den bei der GRS durchgeführten Arbeiten auf (Kock u. a. 2016; Navarro u. a. 2018a). Dort wurden bereits Programme und Skripte zur Erstellung von Modellgittern und für das Postprocessing von TOUGH2-GRS und TOUGH2-GRS-MP erstellt, vgl. (Navarro 2020).

6.1 Verwendete Programme im Workflow

Im Folgenden werden die wesentlichen im Workflow verwendeten Programme kurz vorgestellt. PFLOTTRAN und TOUGH2-GRS sind bereits im Kapitel 3 vorgestellt worden.

6.1.1 SALOME

Die SALOME-Plattform ist in verschiedene Module unterteilt, welche u. a. die Aufgabenbereiche CAD (Computer-aided design, dort Shaper und Geometry), Vernetzung (Mesh, Vernetzungsfunktionen für Finite-Elemente- oder Finite-Volumen-Löser) und Visualisierung (ParaViS) umfasst. SALOME bietet zudem die Möglichkeit zur Erstellung eines Simulations-Workflows mittels YACS (Yet Another Calculation Scheme), der verschiedene Solver miteinander verbindet (CEA 2019).

Die umfassenden Möglichkeiten der Plattform zeigen, dass SALOME den gesamten Workflow einer numerischen Simulation unterstützt. Die Module können direkt über die GUI (Graphical User Interface) von SALOME oder über Python-Skripte angesteuert werden. SALOME ist unter der GNU Lesser General Public License (LGPL) verfügbar. Das Tool wird kontinuierlich weiterentwickelt (CEA 2019).

6.1.2 SALOME-PFLOTRAN-Interface

Mittels der SALOME-GUI erstellte oder importierte Modellgitter und deren Gruppen (z. B. Materialgebiete) können mit dem Python Interface in ein von PFLOTRAN-Code lesbares Format (ASCII- und HDF5, sowie unstrukturierte implizite/explicit Modellgitter) exportiert werden. Folgende Eigenschaften zeichnen das Interface gemäß *Rousseau (2022)* aus:

- Exportieren von 3D- (Volumen) und 2D- (Flächen) Gruppen direkt als Region, um Materialgebiete und Randbedingungen zu definieren.
- Invertes Einlesen eines Gitternetzes in SALOME (nur im impliziten HDF5-Format getestet).
- Bewertung der Netzqualität: Überprüfung auf Nicht-Orthogonalität und Schräglage (skewness).
- INTEGRAL_FLUX-Kartenersteller. Exportieren von 2D-Gruppen in eine Datei, die von PFLOTRAN in verschiedenen Formaten gelesen werden kann: nach Koordinaten und Normalen, Scheitelpunkten (nur für implizite unstrukturierte Gitter) und nach Element-IDs.
- Erstellen von Permeabilitätsdatensätzen für Auflockerungszonen. Ausgehend von einer 3D-Netzgruppe und einer Netzgruppenoberfläche werden für jede Zelle im betrachteten Netz oder in der betrachteten Gruppe der Abstand zur betrachteten Oberfläche und die Richtung des Einheitsvektors berechnet und in einer HDF5-Datei gespeichert. Anschließend wird ein zellindizierter Datensatz der Permeabilität gemäß *Mourzenko u. a. (2012)* erstellt.

Das Tool wird im Rahmen des entwickelten Workflows insbesondere dafür verwendet, in SALOME erzeugte Modellgitter in durch PFLOTRAN lesbare Eingabedateien umzuwandeln. Diese liegen als sog. .ugi Datei vor und werden in PFLOTRAN in der Eingabedatei unter dem Block „GRID“ eingelesen. Das Plugin ist unter der GNU General Public License v3.0 lizenziert.

6.1.3 ParaView

ParaView (Aktuell Version 6) ist ein Open-Source (BSD-lizenziert) und plattformübergreifendes Programm zur Analyse und Visualisierung großer wissenschaftlicher Datensätze. ParaView ist ein erweiterbares Framework mit einer Sammlung von Tools und Bibliotheken für verschiedene Anwendungen, darunter Scripting (mit Python), Webvisualisierung oder In-situ-Analyse (mit ParaView Catalyst). Mit den enthaltenen Python-Modulen können Skripte erstellt werden, die fast alle Funktionen der interaktiven Anwendung ausführen können, vgl. (Avila u. a. 2015; Ayachit 2019).

Das Programm wird im Rahmen des entwickelten Workflows hauptsächlich zur Visualisierung der Rechenergebnisse verwendet. Es können Zustände und Strömungsvektoren für jede Zelle des Kontinuummodells, sowie Zeitreihen als Linienplots dargestellt werden.

6.1.4 Gmsh

Nach Geuzaine u. a. (2009) ist Gmsh ein Open-Source-3D-Finite-Elemente-Netzgenerator mit integrierter CAD-Engine und Postprozessor. Gmsh basiert auf vier Modulen (Geometrie, Netz, Solver und Nachbearbeitung), die über die grafische Benutzeroberfläche oder über die Befehlszeile (Konsole) oder mithilfe von Textdateien in der Gmsh-eigenen Skriptsprache (.geo-Dateien) oder über die Anwendungsprogrammierschnittstelle in C++, C, Python, Julia und Fortran gesteuert werden können (Geuzaine u. a. 2025a). Das Programm wird im Rahmen des Workflows neben SALOME als Visualisierungstool zur Darstellung der Modellgitter verwendet.

6.1.5 Toughio

Ziel der Open-Source Python-API toughio ist es u. a., die Erstellung von Eingabedateien einer TOUGH-Simulation benutzerfreundlich zu gestalten. Toughio ist eine Open-Source-Bibliothek, die Tools zur Vor- und Nachbearbeitung von TOUGH unter Verwendung der folgenden Python-Standards bereitstellt (Luu 2020):

- numpy: vektorisierte Berechnung n-dimensionaler Arrays,
- meshio: Eingabe/Ausgabe für viele Netzformate,
- pyvista: 3D-Plotten und Netzanalyse über eine optimierte Schnittstelle für das Visualization Toolkit (VTK).

Es wird in *Luu (2020)* darauf hingewiesen, dass die Ergebnisse einer TOUGH-Simulation von der Qualität des Gitternetzes abhängen (idealerweise sollte es die Orthogonalitätsbedingung erfüllen). Ein Netz mit zu vielen unförmigen Zellen kann möglicherweise zu unerwarteten Ergebnissen führen, obwohl die Simulation erfolgreich konvergiert ist. Toughio überprüft die Qualität des Netzes nicht. Das Tool wird im Inhouse-Forschungsprojekt ERLa im Preprocessing verwendet zur Generierung eines orthogonalen, für TOUGH2-GRS lesbaren, Modellgitters.

6.2 Preprocessing

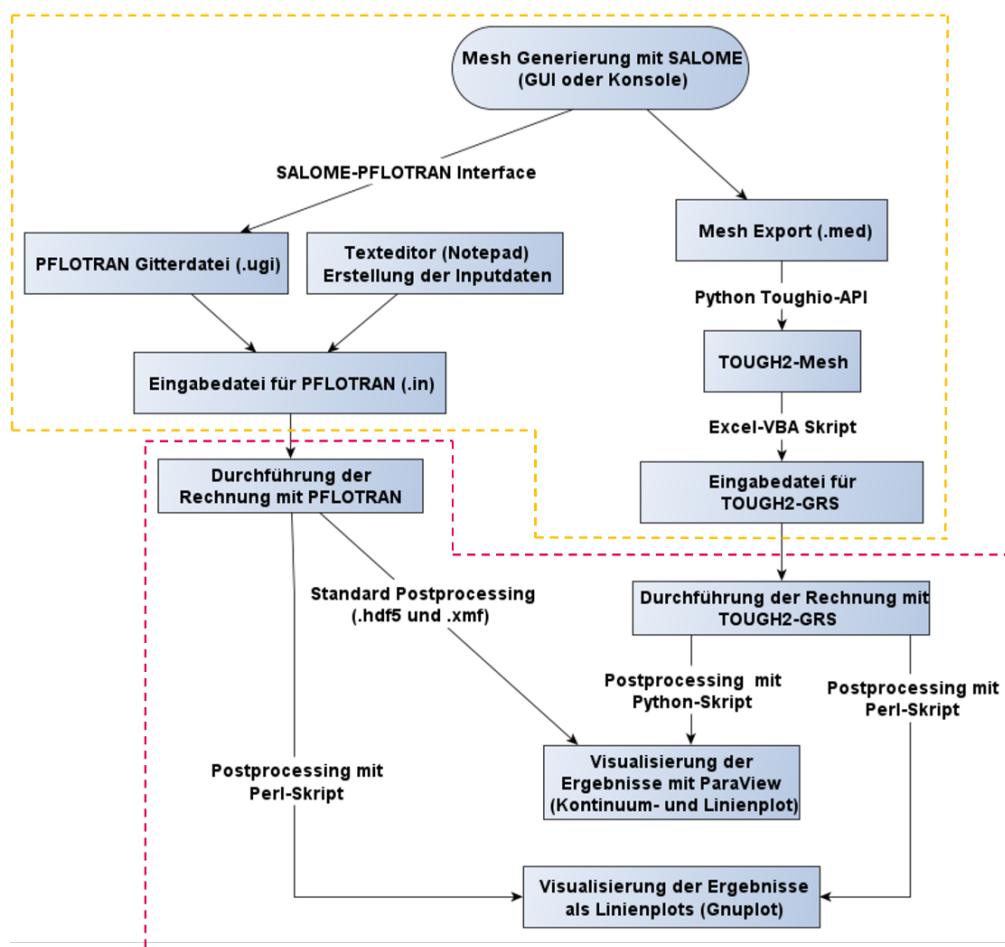


Abb. 6-1: Vereinfachte Darstellung der einzelnen Schritte des Workflows zum Pre- und Postprocessing einer PFLOTRAN- und TOUGH2-Simulation im Inhouse-Forschungsprojekt ERLa. Die gestrichelte gelbe Linie hebt die Schritte zum Preprocessing hervor und die rote Linie hebt die Schritte zum Postprocessing hervor.

Die Abb. 6-1 stellt den Workflow bzw. die verschiedenen Schritte für das Pre- und Postprocessing in ERLa als Flussdiagramm dar. Die Erstellung des Modellgitters er-

folgt in SALOME. Hierfür kann eine bereits vorhandene Modellgeometrie eingelesen und nachfolgend mit dem Mesh-Modul in ein Modellnetz/-gitter überführt werden. SALOME beinhaltet jedoch auch alle Werkzeuge, wie z. B. ein CAD-Modul, um Geometrien direkt in SALOME erstellen zu können (vgl. Kapitel 6.1.1). Nachfolgend kann das erstellte Modellgitter direkt über das Python-Plugin (vgl. Kapitel 6.1.2) in ein PFLOTRAN kompatibles Modellgitter exportiert werden (linker Strang in Abb. 6-1) oder z. B. als .med Datei gespeichert werden um diese weiterverarbeiten zu können. Die .med Datei wird benötigt, um das TOUGH2-Modellgitter erstellen zu können (rechter Strang in Abb. 6-1). Das Modellgitter bildet zusammen mit der Eingabedatei, in der die Modellparameter geschrieben werden, den letztendlichen Rechenfall.

6.3 Anforderungen an das Modellgitterformat

An das Format zur Speicherung des Modellgitters, wurden verschiedene Anforderungen gestellt, zum Beispiel:

- Speicherung orthogonaler und unstrukturierter Modellgitter,
- Speicherung der Modellgebiete bzw. Materialgebietsnamen als String für Regionen oder einzelne Elemente/Zellen,
- Speicherung der Zustände und Flüsse für einzelne Elemente/Zellen.

Folgende Dateiformate haben sich als geeignet herausgestellt bzw. erfüllen die genannten Anforderungen.

Gmsh (.msh Format)

Das .msh Dateiformat Version 4 (aktuelle Version 4.2) enthält einen obligatorischen Abschnitt mit Informationen zur Datei (\$MeshFormat), gefolgt von mehreren optionalen Blöcken, die z. B. die Namen der physikalischen Gruppen bzw. Materialgebiete (\$PhysicalName), die elementaren Modellentitäten (\$Entities), die sog. partitionierten Entitäten (\$PartitionedEntities), die Knoten (\$Nodes), die Zellen bzw. Elemente (\$Elements), die Parametrisierungen (\$Parametrizations) und die Postprocessing-Datensätze (\$NodeData, \$ElementData, \$ElementNodeData) enthalten. Die Abschnitte spiegeln das zugrunde liegende Gmsh-Datenmodell wider: \$Entities speichert die Grenzdarstellung der geometrischen Entitäten des Modells, \$Nodes und \$Elements speichern die auf diese Entitäten klassifizierten Netzdaten und \$NodeData, \$ElementData, \$ElementNodeData speichern Postprocessing-Daten (Ansichten) (Geuzaine u. a. 2025b).

Um ein einfaches Netz darzustellen, sollten mindestens die Abschnitte `$MeshFormat`, `$Nodes` und `$Elements` in der Datei vorhanden sein. Es wird davon ausgegangen, dass Knoten vor Elementen definiert werden. Um ein Netz mit der vollständigen Topologie (BRep) des Modells und den zugehörigen physikalischen Gruppen darzustellen, sollte vor dem Abschnitt `$Nodes` ein Abschnitt `$Entities` enthalten sein. Abschnitte können in derselben Datei wiederholt werden, somit sind auch gemischte bzw. hybride Gitter möglich. Postprocessing-Abschnitte können in separaten Dateien abgelegt werden (z. B. eine Datei pro Zeitschritt). Jeder Abschnitt mit einem nicht erkannten Header wird standardmäßig als Modellattribut gespeichert. Es können somit z. B. Kommentare in einen `$Comments/ $EndComments`-Abschnitt in einer `.msh`-Datei hinzugefügt werden (Geuzaine u. a. 2025b).

CGNS (.cgns Format)

Das sog. CFD General Notation System (CGNS) bietet einen allgemeinen, portablen und erweiterbaren Standard für die Speicherung und den Abruf von Daten aus der numerischen Strömungsmechanik (CFD). Das System besteht aus zwei Teilen (CGNS 2025):

- einem Standardformat für die Aufzeichnung der Daten und
- einer Software, die Daten in diesem Format liest, schreibt und modifiziert.

Der CGNS-Standard kann u. a. mit folgenden Datentypen umgehen (CGNS 2025):

- Strukturierte, unstrukturierte und hybride Gitter,
- Strömungsdaten, die nodal, zellzentriert, flächenzentriert oder kantenzentriert sein können,
- Multizonen-Schnittstellenkonnektivität, sowohl aneinandergrenzend als auch überlappend,
- Randbedingungen,
- Beschreibung von Strömungsgleichungen, einschließlich Zustandsgleichung, Viskositäts- und Wärmeleitfähigkeitsmodellen, Turbulenzmodellen und Mehrkomponenten-Chemie-Modellen,
- Zeitabhängige Strömung, einschließlich beweglicher und verformbarer Gitter.

SALOME (.med Format)

Das `.med`-Dateiformat (Model for Exchange of Data) ist ein spezialisiertes Binärformat, das im Bereich der numerischen Simulation (vor allem innerhalb der SALOME-

Plattform und dem Solver Code_Aster), von EDF (Électricité de France) R&D und ECA (European Computational Aerosciences), für den Austausch von Netzdateien entwickelt wurde. Es basiert technisch auf der HDF5-Bibliothek, was bedeutet, dass eine .med-Datei eigentlich eine strukturierte Datenbank ist (EDF 2019; EDF 2026).

In einer MED-Datei sind die Knoten und Elemente in Gruppen unterteilt. Jede Gruppe entspricht einer MED-Familie. Innerhalb dieser Familien sind die Gruppen verteilt: Es gibt also Knoten- und Elementfamilien. Beim Einlesen einer MED-Datei werden durch die Aufteilung der Familien dynamisch Listen von Knoten- und Elementgruppen erstellt (EDF 2019).

HDF5 (.h5py)

HDF5 (Hierarchical Data Format, Version 5) ist ein flexibles Dateiformat zum Speichern und Organisieren großer Datenmengen. Eine HDF5-Datei kann als eine Art Container (oder Ordner) gesehen werden, der viele verschiedene Datenelemente in einer Hierarchie enthält. HDF5 organisiert Daten mithilfe zweier Hauptbausteine (HDF Group 2015; HDF Group 2026):

- Gruppen – vergleichbar mit Ordnern in einem Dateisystem. Sie enthalten andere Gruppen oder Datendateien.
- Datensätze – vergleichbar mit Dateien, die die eigentlichen Daten (Zahlen, Arrays, Tabellen usw.) enthalten.

Gruppen und Datensätze lassen sich verschachteln, um eine Hierarchie zu erstellen, genau wie Ordner und Unterordner auf dem Computer. Ein Datensatz enthält außerdem Metadaten (Informationen über die Daten), wie z. B. Datentyp und Dimensionen (HDF Group 2026).

.vtk oder xdmf

Das VTK XML-Dateiformat ist der aktuelle Standard des Visualization Toolkit (VTK) zum Speichern von wissenschaftlichen Daten. Es ist modular, unterstützt paralleles Rechnen und bietet eine bessere Leistung bei großen Datenmengen (Avila, L. S. u. a. 2010).

Es werden zwei Haupttypen unterschieden (Avila, L. S. u. a. 2010):

- Serielle Dateien (.vti, .vtp, .vtr, .vts, .vtu): Enthalten alle Daten in einer einzigen Datei. Sie sind für Einzelprozess-Anwendungen gedacht.

- Parallele Dateien (.pvti, .pvtp, .pvtr, .pvts, .pvtu): Enthalten selbst keine Maschendaten. Sie fungieren als „Master-Datei“, die auf mehrere serielle Dateien (sogenannte „Pieces“) verweist. Dies ermöglicht es verschiedenen Prozessoren, gleichzeitig an verschiedenen Teilen eines Datensatzes zu arbeiten. Für Simulationsrechnungen eignet sich z. B. das .vtu Format für unstrukturierte Gitter bzw. beliebige Kombinationen aus Zellen (Tetraeder, Hexaeder etc.).

6.4 Erstellen eines Modellgitters mit der SALOME-GUI über das Mesh Modul

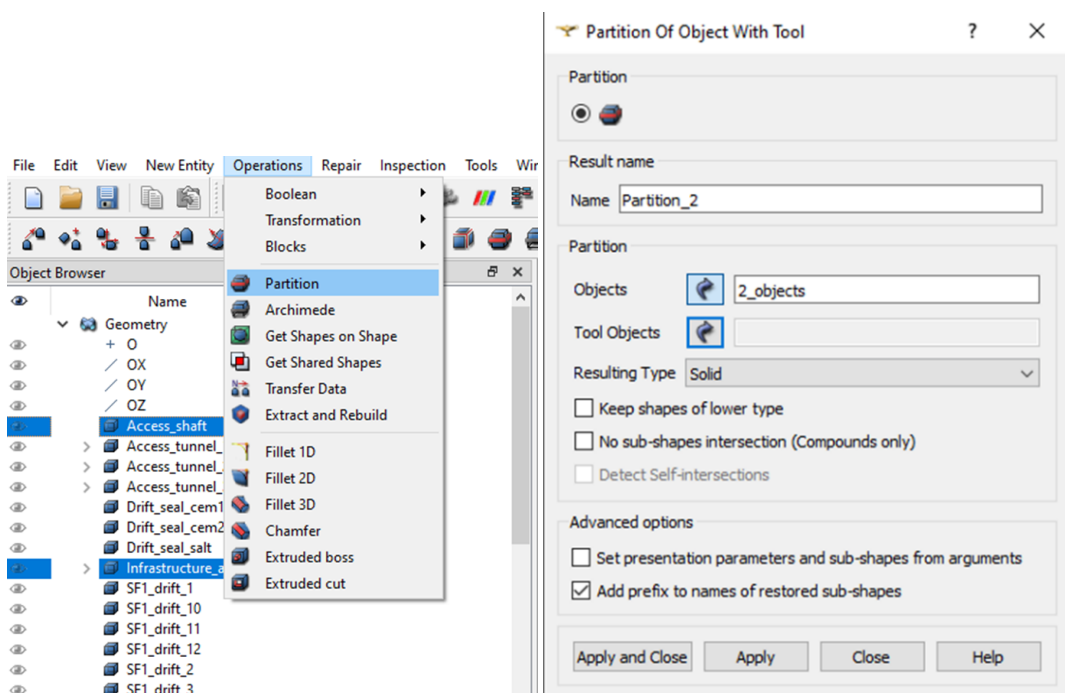


Abb. 6-2: Darstellung der Schritte zur Erstellung einer Partition.

Im Folgenden wird beispielhaft die Generierung eines Modellgitters auf Basis einer Modellgeometrie in SALOME (Version 9.15) beschrieben. Die Modellgeometrie wurde von *LaForce u. a. (2024)* übernommen. Die Erstellung einer Modellgeometrie, z. B. mit dem Shaper- oder Geometrie-Modul in SALOME, wird hier nicht beschrieben. Hier sei auf einschlägige Tutorials verwiesen. Die Geometrie muss jedoch gewisse Voraussetzungen erfüllen, damit z. B. später die Materialgebiete in der Gittererstellung automatisch erstellt werden. Einzelne Geometrieobjekte (z. B. Strecken, Infrastrukturbereich und Schacht) müssen zu einer Gesamtgeometrie zusammengefasst werden (vgl. Abb. 6-2 links). Hierzu müssen die einzelnen Objekte im Geometrie-Modul

ausgewählt und dann unter Operations → Partition als Gruppe zusammengefasst werden. Bei „Resulting Type“ muss „Solid“ ausgewählt werden (vgl. Abb. 6-2 rechts).

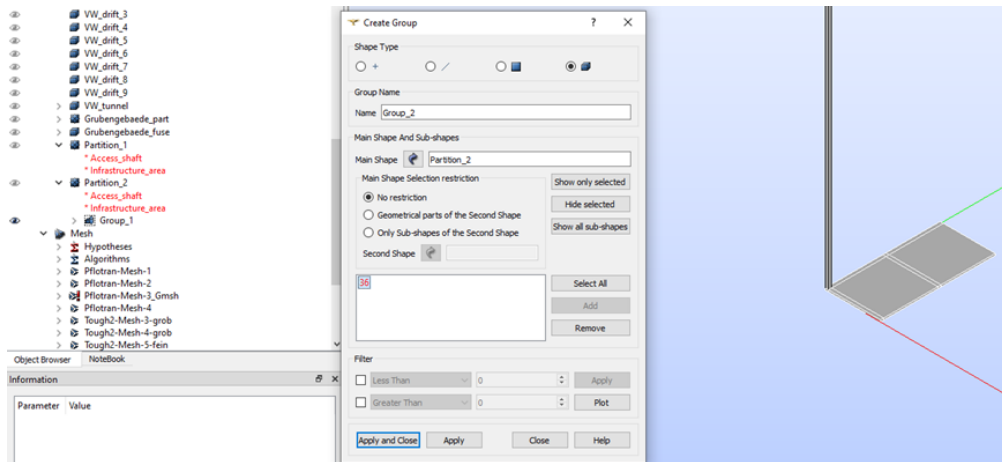


Abb. 6-3: Einstellungen zur Generierung von Gruppen.

Um später die Gruppen für das Mesh übernehmen zu können, müssen diese im Geometrie-Modul entsprechend erstellt werden (vgl. Abb. 6-3):

- Create Group auswählen,
- Checkbox bei Volumen (Shape Type ganz rechts),
- Gruppennamen ändern (Group Name),
- Subgeometrie, wie z. B. Schacht in der GUI auswählen, mit Rechtsklick und mit Add der Auswahl hinzufügen,
- nach Beendigung der Auswahl, Apply and Close am Ende drücken.

Zur anschließenden Gittererstellung muss zunächst das Mesh-Modul in SALOME ausgewählt und die Geometrie geöffnet bzw. importiert werden, wenn dies nicht schon erfolgt ist. Zur Erstellung hexagonaler Gitter können verschiedene Algorithmen verwendet werden, welche im Folgenden beschrieben werden.

6.4.1 Mesh-Methode 1: Hexahedron (i,j,k)

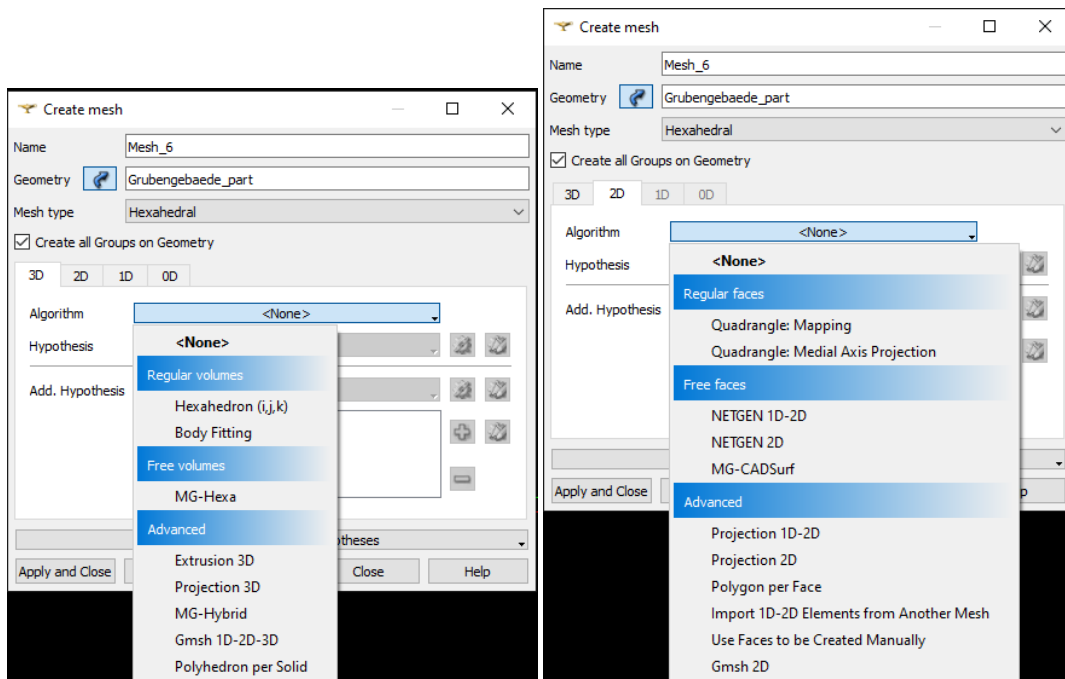


Abb. 6-4: Darstellung der Schritte zur Erstellung hexagonaler Gitter.

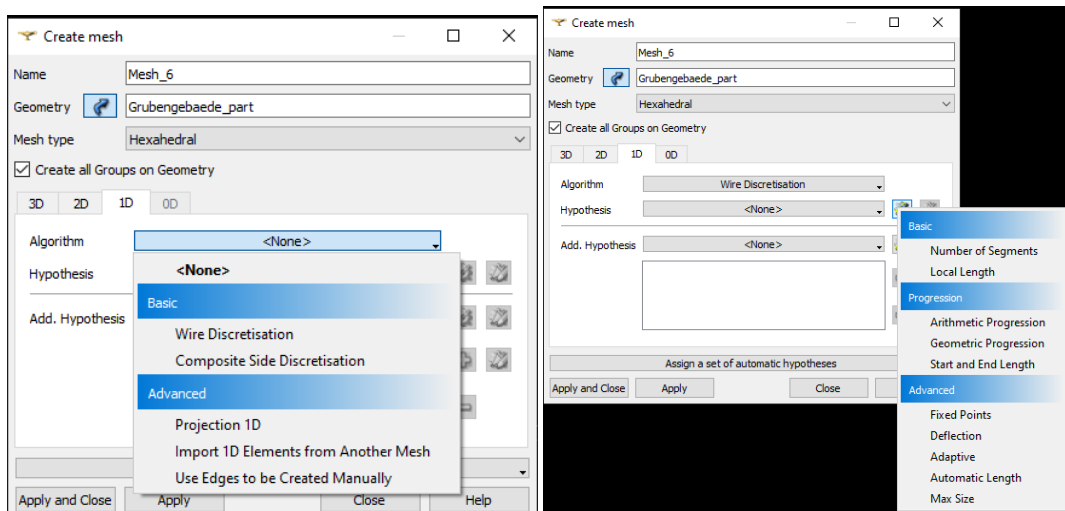


Abb. 6-5: Darstellung der Schritte zur Erstellung hexagonaler Gitter.

Im Mesh-Modul in SALOME wird unter Mesh → Create Mesh das Menü zum Erstellen der Vergitterung geöffnet. Je nach Algorithmus müssen Einstellungen für 3D (Volumen), 2D (Flächen) und 1D (Punkte) gemacht werden:

1. Geometrie auswählen, wie z. B. im oberen Beispiel "Grubengebäude_part"

2. Mesh type auswählen → "Hexahedral" (vgl. Abb. 6-4 links)
3. Checkbox aktivieren bei "Create all Groups on Geometry (vgl. Abb. 6-4 links)
4. 3D → Algorithm → Hexahedron (i,j,k) (vgl. Abb. 6-4 links)
5. 2D → Quadrangle Mapping (bevorzugt) oder Netgen 1D-2D, Netgen 2D oder Gmsh 2D). Bei Hypothesis bzw. dem Zahnrad muss noch die Art des Mappings eingestellt werden, hier „Standard“ auswählen. (vgl. Abb. 6-4 rechts) Danach wird die Eingabe mit „Apply and Close“ geschlossen. Die Vernetzung erfolgt nicht automatisch, der Vorgang muss unter Mesh → Compute manuell gestartet werden.
6. 1D → Algorithm → Für die 1D Einstellungen wird zunächst „Wire Discretization“ ausgewählt (vgl. Abb. 6-5 links)
7. Als Hypothesis „Local Length“ ausgewählt. Hier wird die globale max. Länge der zu erstellenden Elemente festgelegt (vgl. Abb. 6-5 rechts).

Zuletzt über „Apply and Close“ die Auswahl beenden. Danach muss noch im Menü, unter dem Reiter Mesh → Compute ausgeführt werden, erst dann wird das Mesh berechnet.

6.4.2 Mesh-Methode 2: Body-Fitting

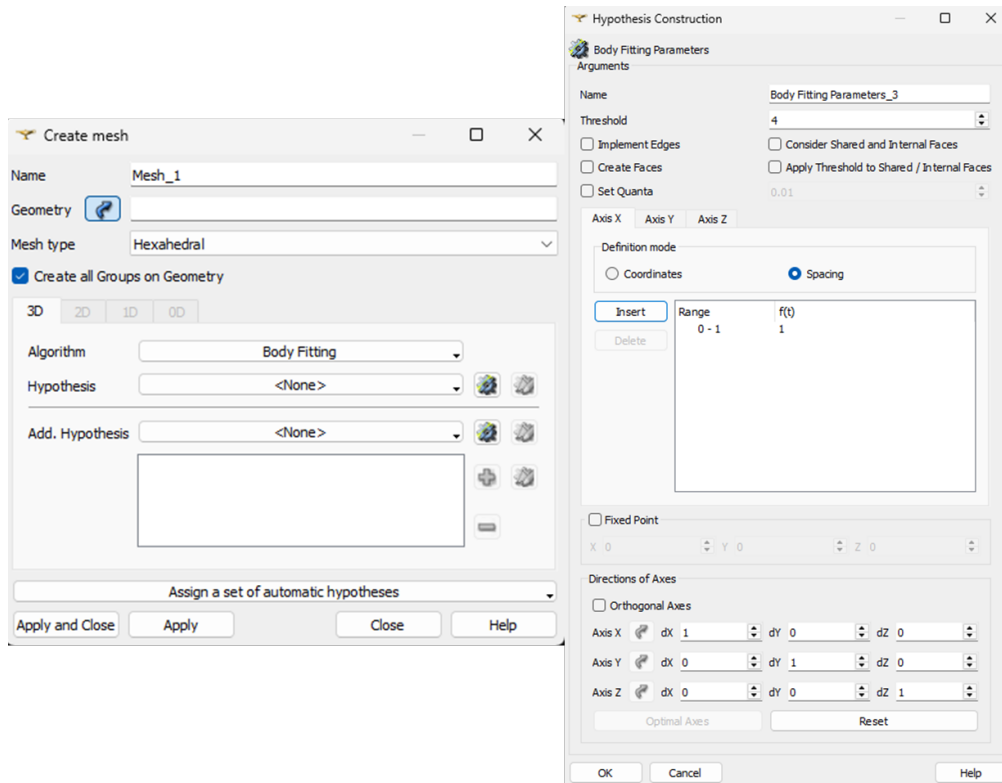


Abb. 6-6: Einstellungen zur Generierung von Modellnetzen durch den Body-Fitting-Ansatz.

Eine weitere nützliche Methode zur Vernetzung der Geometrie ist der Body-Fitting-Ansatz. Hier können in x-y-z Richtung die Elementgrößen eingegeben werden. Beachte: Die Elementlängen müssen vom Anwender an die Objektstrukturen angepasst werden, damit konforme Gitter resultieren. Eine automatische Anpassung bzw. Optimierung der Strukturen ist nicht vorgesehen. Die Vorgehensweise ist identisch zur Beschreibung in Kapitel 6.4.1. Abweichend davon muss im Schritt 4 unter Algorithm → Body Fitting ausgewählt werden (vgl. Abb. 6-6). Es werden ausschließlich Eingaben in 3D erstellt.

Folgende Einstellungen müssen im Eingabefeld „Body fitting parameters“ erfolgen:

- Checkbox bei „Implement Edges“ aktivieren, damit aneinandergrenzende Strukturen beachtet werden.
- Darauf achten, dass „Create Faces“ eingeschaltet ist, sonst können später keine Flächen ausgewählt werden, z. B. für Randbedingungen in PFLOTTRAN. Die Aktivierung der anderen Checkboxes führte zu Fehlern
- Über „Coordinates“ oder „Spacing“ können z. B. für die verschiedenen Ach-

senrichtungen (Axis X, Y und Z) unterschiedliche Layer mit unterschiedlicher Mächtigkeit und Diskretisierung realisiert werden.

Zuletzt über „Apply and Close“ die Auswahl beenden. Danach muss noch im Menü, unter dem Reiter Mesh → Compute ausgeführt werden, erst dann wird das Mesh berechnet.

6.4.3 Erstellen der Randbedingung

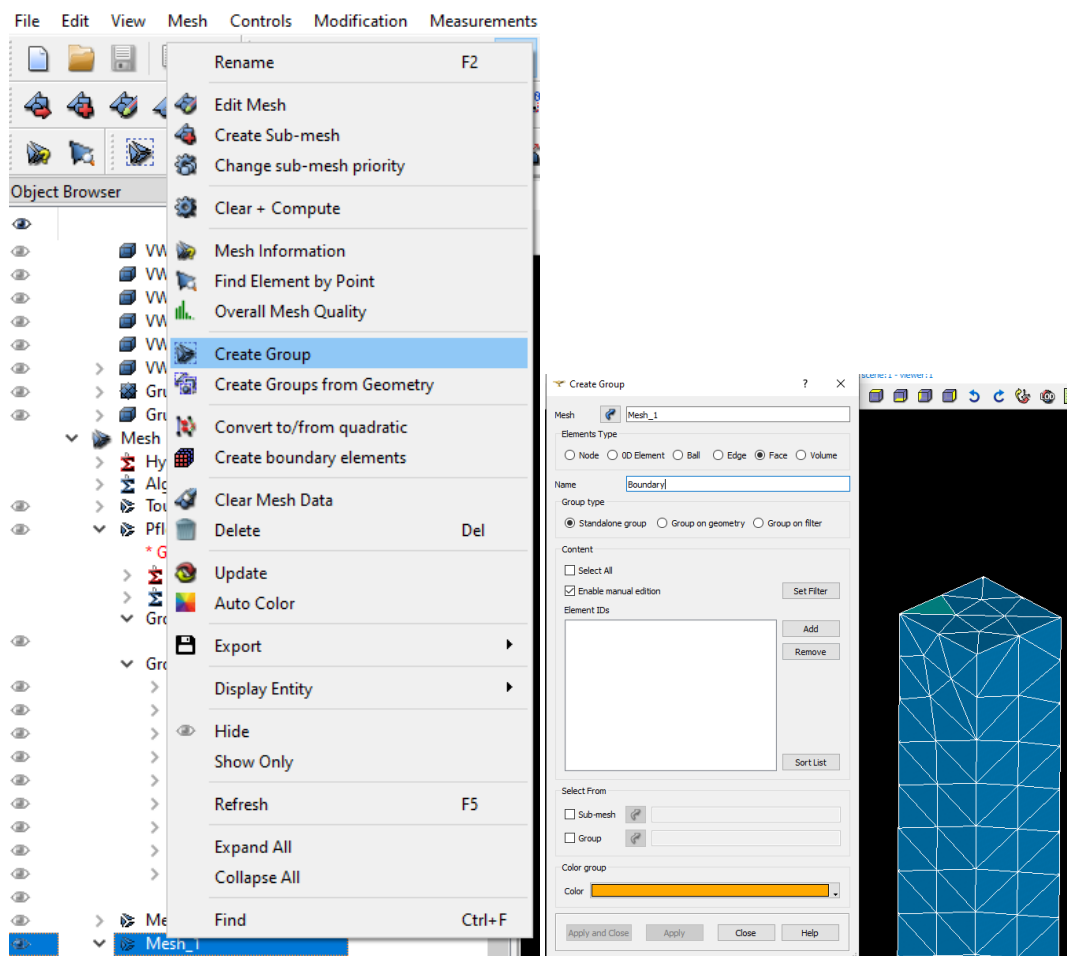


Abb. 6-7: Erstellung einer Randbedingung für PFLTRAN.

In PFLTRAN werden Randbedingungen, wie z. B. eine Druck- oder Flussrandbedingung, über Flächen generiert. Hierfür wird das Mesh ausgewählt und dann über Mesh → Create Group die entsprechende Eingabemaske aufgerufen (vgl. Abb. 6-7).

Folgende Einstellungen müssen erfolgen:

- Auswahl des Elements Type → Face

- Namen der Randbedingung eingeben
- Checkbox unter „Enable manuell edition“, mit Shift und linker Maustaste die einzelnen Flächen auswählen und Add drücken. Im Beispiel ist ein Tetraedergitter aufgeführt. Für ein Hexaedergitter ist das Vorgehen das Gleiche.
- Über „Add“ werden die Element IDs der Auswahl hinzugefügt. Über Remove können einzelne IDs bzw. Flächen auch wieder entfernt werden.
- Zuletzt über „Apply and Close“ die Auswahl beenden.

Das manuelle Hinzufügen von Materialgebieten zum Mesh erfolgt ähnlich. Hier muss bei Element-Type „Volumen“ für ganze Elemente ausgewählt werden. Somit würde z. B. die Randbedingung für das TOUGH2-Gitter erstellt werden, welche wie bereits erwähnt ganze (sog. inaktive) Volumenelemente benötigt.

6.4.4 Anmerkungen

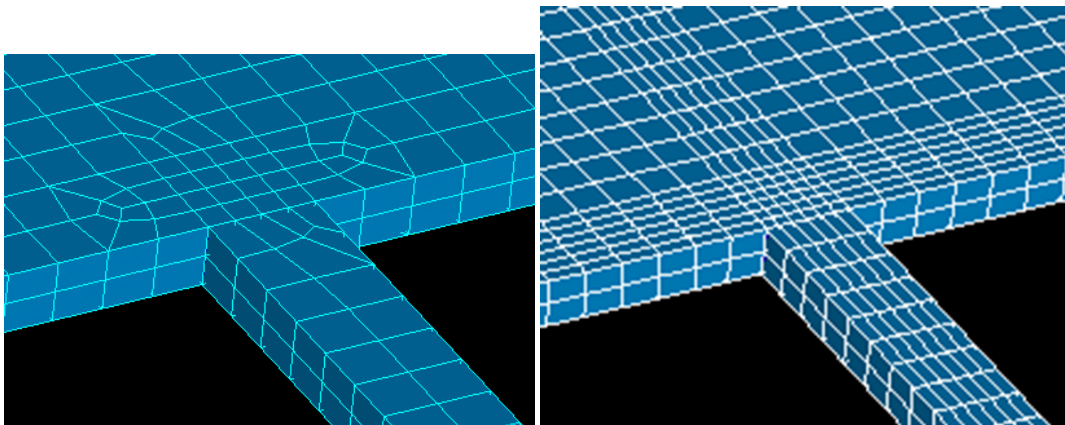


Abb. 6-8: Beispiele für ein nicht orthogonales (links) und ein orthogonales Modellgitter (rechts).

Es wurde untersucht, welche Kombination an Algorithmen zur Gittererstellung in 3D, 2D und 1D in SALOME ein optimales Mesh erzeugen. Oft ist das resultierende Mesh an den Verbindungspunkten, z. B. Strecken und Kammern nicht optimal (Abb. 6-8 links). Insbesondere TOUGH2 benötigt orthogonale Modellgitter und es sollten Modellgitter, wie in Abb. 6-8 rechts, erstellt werden.

6.4.5 Export der Modellgitter für TOUGH2 und PFLTRAN

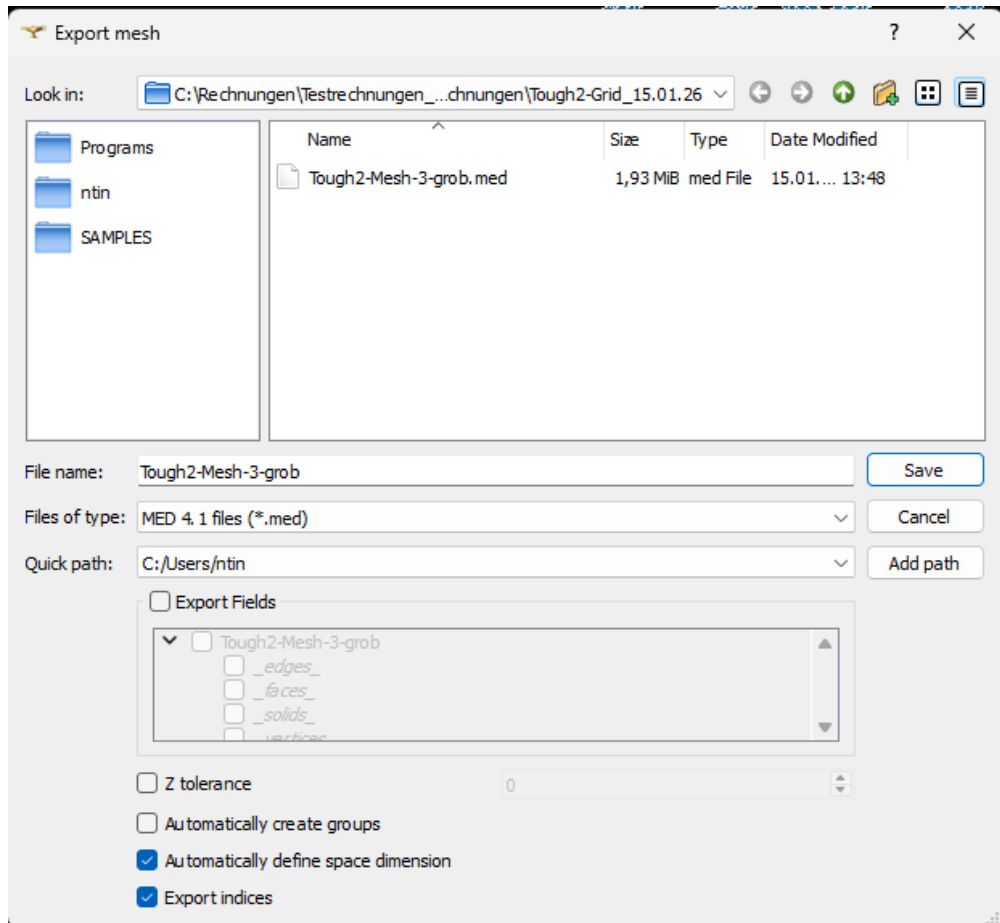


Abb. 6-9: Export des .med Formats aus SALOME.

Das TOUGH2-Modellgitter wird zunächst aus SALOME als .med-File exportiert und dann mittels eines Python-Skriptes und der toughio API (vgl. Kapitel 6.1.5) in ein TOUGH2-konformes Gitter überführt.

Zu beachten ist, dass nur der Export des .med Formates in der Version 4.1 (siehe Abb. 6-9) aus SALOME vernünftige Ergebnisse mit toughio erzeugt. Der Export des .cgns-Formates und eine nachfolgende Mesh-Generierung mit toughio führte nicht zu einem befriedigendem Ergebnis. Optional kann das .med-Format von Gmsh und das .cgns-Format in ParaView eingelesen und dargestellt werden.

6.5 Postprocessing

Für das Postprocessing bzw. die Nachbearbeitung und Visualisierung der Ergebnisdaten aus den Simulationsrechnungen, werden zwei wesentliche Stränge unterschieden. Zum einen die Erstellung von Linienplots und zum anderen die Visualisierung der Zustände und Fluidflüsse im gesamten Grubengebäude (sog. Kontinuum-Plots) (vgl. Abb. 6-1, Arbeitsschritte innerhalb der roten gestrichelten Linie).

Die einzelnen Schritte des Preprocessings wurden bereits in Kapitel 6.2 beschrieben. PFLOTTRAN schreibt automatisch die zur Visualisierung erforderlichen xmf- und hdf5-Dateien aus, welche direkt in ParaView eingelesen werden können. Für TOUGH2-GRS wurde ein Python Skript programmiert, welches die Konvertierung der Simulationsergebnisse in ParaView lesbare Dateien überführt.

Zur Extraktion von Daten für Linienplots wurde ein Skript weiterentwickelt, welches auf der Programmiersprache Perl basiert und schon in vorherigen Projekten, z. B. *Frieling u. a. (2018)*, entwickelt wurde. Mit diesem Skript ist es möglich, verschiedene Messpunkte bzw. Elemente und deren Zustands- sowie Flussvariablen aus unterschiedlichen Rechenfällen in einer Abbildung zu kombinieren bzw. zusammenzuführen. Somit ist es möglich, die Simulationsergebnisse von TOUGH2-GRS und PFLOTTRAN als Linienplots vergleichen zu können.

Im Folgenden wird das spezifische Postprocessing für PFLOTTRAN und TOUGH2-GRS näher erläutert.

6.5.1 Postprocessing für PFLOTTRAN

Gemäß *Pfлотran (2026d)* kann die Visualisierung der von PFLOTTRAN erzeugten Ergebnisdaten mithilfe verschiedener Tools, darunter kommerzieller und Open-Source-Software, erfolgen. Die Visualisierung von 2D- oder 3D-Ausgabedateien ist mit dem kommerziellen Programm Tecplot oder den Open-Source-Programmen ParaView und VisIt möglich. Sowohl ParaView als auch VisIt ermöglichen die Visualisierung auf parallelen Architekturen. In der PFLOTTRAN-Eingabedatei kann unter dem Schlüsselwort „OUTPUT“ für das sog. SNAPSHOT_FILE das jeweilige Ausgabeformat gewählt werden. Verfügbare Optionen sind unter anderem TECPLOT BLOCK, TECPLOT POINT, VTK, HDF5, HDF5 SINGLE_FILE oder HDF5 MULTIPLE_FILES. Im Inhouse-Forschungsprojekt ERLa wurde die Option HDF5 SINGLE_FILE gewählt. Hierbei werden alle Daten im h5-Format gespeichert, was den Datenzugriff erleichtert, im

Gegensatz zu der Option MULTIPLE_FILES, wo für jeden Zeitschritt eine separate Datei erzeugt wird.

Zudem gibt es die Möglichkeit sich im sog. OBSERVATION_FILE für bestimmte Messpunkte ausgewählte Zustandsvariablen ausgeben zu lassen. Eine weitere Möglichkeit ist die Ausgabe von Daten im sog. MASS_BALANCE FILE. In der Datei werden Massenbilanzen für das gesamte Grubengebäude oder Massenströme zwischen einzelnen Materialgebieten ausgegeben. Die Tab. 6-1 fasst die Möglichkeiten zur Visualisierung der Ergebnisdaten in PFLOTRAN nochmal zusammen.

Tab. 6-1: Ausgabedateien einer PFLOTRAN Simulation und Möglichkeiten zur Visualisierung der Ergebnisdaten, vgl. (Pflotran 2026d).

Ausgabedatei	Beschreibung	Möglichkeiten zur Visualisierung
Standardausgabe (.out)	In die Standardausgabe werden alle Informationen zum Einlesen der Eingabeparameter und zum Simulationslauf geschrieben.	Plotten z. B. des Zeitschrittweitenverlaufs und der Residuen des Löser (Perl-Skript).
SNAPSHOT FILE (.xmf und .h5)	Eine Snapshot-Datei enthält die Werte ausgewählter Variablen für das gesamte Kontinuum bzw. der einzelnen Gitterelemente, zu bestimmten vorgegebenen Zeitpunkten.	PFLOTRAN erstellt standardmäßig .xmf Dateien die in Verbindung mit der .h5 Datei z. B. in Paraview darstellt werden können. Aus der .h5 Datei können direkt Linienplots erstellt werden (Perl-Skript).
OBSERVATION FILE (obs-o.pft)	Eine sog. Beobachtungsdatei enthält die Werte ausgewählter Variablen an bestimmten Messpunkten zu verschiedenen vorgegebenen Zeitpunkten.	Darstellung der Zeitverläufe der Variablen für die verschiedenen Messpunkte als Linienplots (Perl-Skript).
MASS_BALANCE FILE (mas.dat)	Es wird eine Massenbilanzausgabe generiert, die die globale Massenbilanz sowie die Flüsse an allen Grenzen für Wasser und die in CHEMISTRY zur Ausgabe angegebenen chemischen Spezies enthält.	Darstellung der Zeitverläufe zur Massenbilanz, sowie der Flüsse zwischen einzelnen Regionen als Linienplots (Perl-Skript).

6.5.2 Postprocessing für TOUGH2-GRS

Die Ergebnisdaten eines TOUGH2-GRS Simulationslaufes werden in unterschiedliche Dateien gespeichert, siehe Tab. 6-2. Es werden alle Metadaten, sowie Informationen zum Löser und Zeitschrittweiten in eine Standardausgabe „OUTFILE“ geschrieben. Diese Datei ist vergleichbar zur Standardausgabe (.out) von PFLOTRAN.

TOUGH2-GRS schreibt zudem für benutzerdefinierte Zeitpunkte (angegeben in den Datenblöcken TIMES oder PTIME) globale elementspezifische Informationen in zwei Hauptdateien aus. Die sog. ELE_MAIN Datei enthält die Variablenzustände, wie z. B. Druck und Temperatur. Die sog. CON_MAIN Datei enthält Connection-spezifische Ausgaben der Flussvariablen (z. B. Lösungs- und Gasfluss) , vgl. (Navarro 2020).

Die Dateien FOFT und COFT speichern die Zustände und Flüsse benutzerdefinierter Elemente bzw. Connections, die im Datenblock FOFT bzw. COFT angegeben werden. Die Häufigkeit der Ausdrücke kann über den Datenblock CNTRL angepasst werden. Für weitere Informationen siehe Navarro (2020) , Kapitel 17 dort.

Tab. 6-2: Ausgabedateien einer TOUGH2-GRS Simulation und Möglichkeiten zur Visualisierung der Ergebnisdaten, vgl. (Navarro 2020).

Ausgabedatei	Beschreibung	Möglichkeiten zur Visualisierung
Standardausgabe (OUTFILE)	In die Standardausgabe werden alle Informationen zum Einlesen der Eingabeparameter und zum Simulationslauf, sowie die Werte ausgewählter Variablen für das gesamte Kontinuum bzw. der einzelnen Gitterelemente, zu bestimmten vorgegebenen Zeitpunkten geschrieben.	Darstellung z. B. des Zeitschrittweitenverlaufs (Perl-Skript). Aus der Datei können direkt Linienplots der Zeitverläufe der Variablen für die verschiedenen Elemente erstellt werden (Perl-Skript).
Variablenzustände		
ELE_MAIN	Die Datei enthält die Zustände für ausgewählte Variablen für alle Elemente zu bestimmten Zeitpunkten.	Erstellen von Linienplots der Zeitverläufe ausgewählter Variablen für die verschiedenen Elemente (Perl-Skript). Generierung von .vtk Dateien zum Einlesen in ParaView (Python-Skript).

Tab. 6-2: Ausgabedateien einer TOUGH2-GRS Simulation und Möglichkeiten zur Visualisierung der Ergebnisdaten, vgl. (Navarro 2020). (Fortsetzung)

Flüsse		
CON_MAIN	Die Datei enthält die Fluidflüsse und ausgewählter RN-Transport für alle Elemente zu bestimmten Zeitpunkten.	Erstellen von Linienplots der Zeitverläufe ausgewählter Variablen für die verschiedenen Elemente (Perl-Skript). Generierung von .vtk Dateien zum Einlesen in ParaView (Python-Skript).
Elementspezifische Zustände und Flüsse		
FOFT, COFT	Die Dateien enthalten die Werte ausgewählter Variablen an bestimmten Messpunkten zu verschiedenen vorgegebenen Zeitpunkten.	Darstellung der Zeitverläufe der Variablen für die verschiedenen Messpunkte als Linienplots (Perl-Skript).
Materialspezifische Massenströme		
DOFT	Massenströme über Materialgrenzen bzw. Materialgebieten.	Darstellung z. B. des zeitlichen Verlaufs der Fluidströme über Materialgrenzen.

6.6 Ausblick

Neben der Erstellung eines Modellgitters mit der SALOME-GUI, wurde zudem die skriptbasierte Erstellung eines Modellgitters mittels der gmsh Python-API in der Konsole getestet. Die Arbeiten wurden begonnen, es zeigte sich jedoch, dass die Erstellung und Bearbeitung des bereits vorhandenen Modellgitters in SALOME als ausreichend und für diese Projektphase als zielführender herausstellte.

Die skriptbasierte bzw. konsolenbasierte Erstellung eines Modellgitters ermöglicht in spezifischen Fällen eine beschleunigte Erstellung und Adaption von Gitterelementen. In der SALOME-GUI sind hierfür unter Umständen mehrere Arbeitsschritte notwendig. Zudem könnte der Workflow zur gleichzeitigen Erzeugung von TOUGH2 und PFLOTTRAN Modellgittern weiter automatisiert werden.

Die Syntax der Python API in Salome (sog. smesh) ähnelt sehr der in Gmsh. Deshalb soll im Nachfolgeprojekt ERLa2 die skriptbasierte Gittererstellung in SALOME getestet werden. Die bereits erstellten Python Skripte sollen dann innerhalb von SALOME genutzt werden.

7 Validierung des Pre- und Postprocessing-Workflows

Gerd Frieling

Im vorliegenden Kapitel wird der im Kap. 6 beschriebene Workflow zum Pre- und Postprocessing mit Simulationsrechnungen am Beispiel eines generischen Endlagermodells getestet. Hierfür werden die Rechenergebnisse der beiden Programme PFLOTTRAN und TOUGH2-GRS (siehe Kap. 3.1) verglichen. PFLOTTRAN wird im sog. General Mode (vgl. (Pflotran 2026d)) und TOUGH2-GRS mit einem modifizierten EOS7-Modul ausgeführt (Navarro 2020). Beide Optionen bieten die Möglichkeit zweiphasige Zustände (Flüssigkeit + Gas) und deren Wechselwirkungen simulieren zu können. Weiterführende Informationen, bzw. eine Einführung zum Zweiphasenfluss in porösen Medien finden sich in Bear (2018) und (Feder u. a. 2022).

Zur Vereinfachung und Beschleunigung der Arbeiten wurde ein generisches Modell verwendet, welches bereits für ein parallel laufendes Forschungsprojekt im BASE verwendet wird (siehe DECOVALEX (Birkholzer u. a. 2019)). Im Folgenden sind die Annahmen zum Rechenmodell zusammengefasst, die für die vergleichende Berechnung des Zweiphasenflusses in einem generischen Endlager im Steinsalz verwendet wurden. Für ergänzende und weiterführende Informationen siehe (LaForce u. a. 2024).

7.1 Allgemeine Modellannahmen

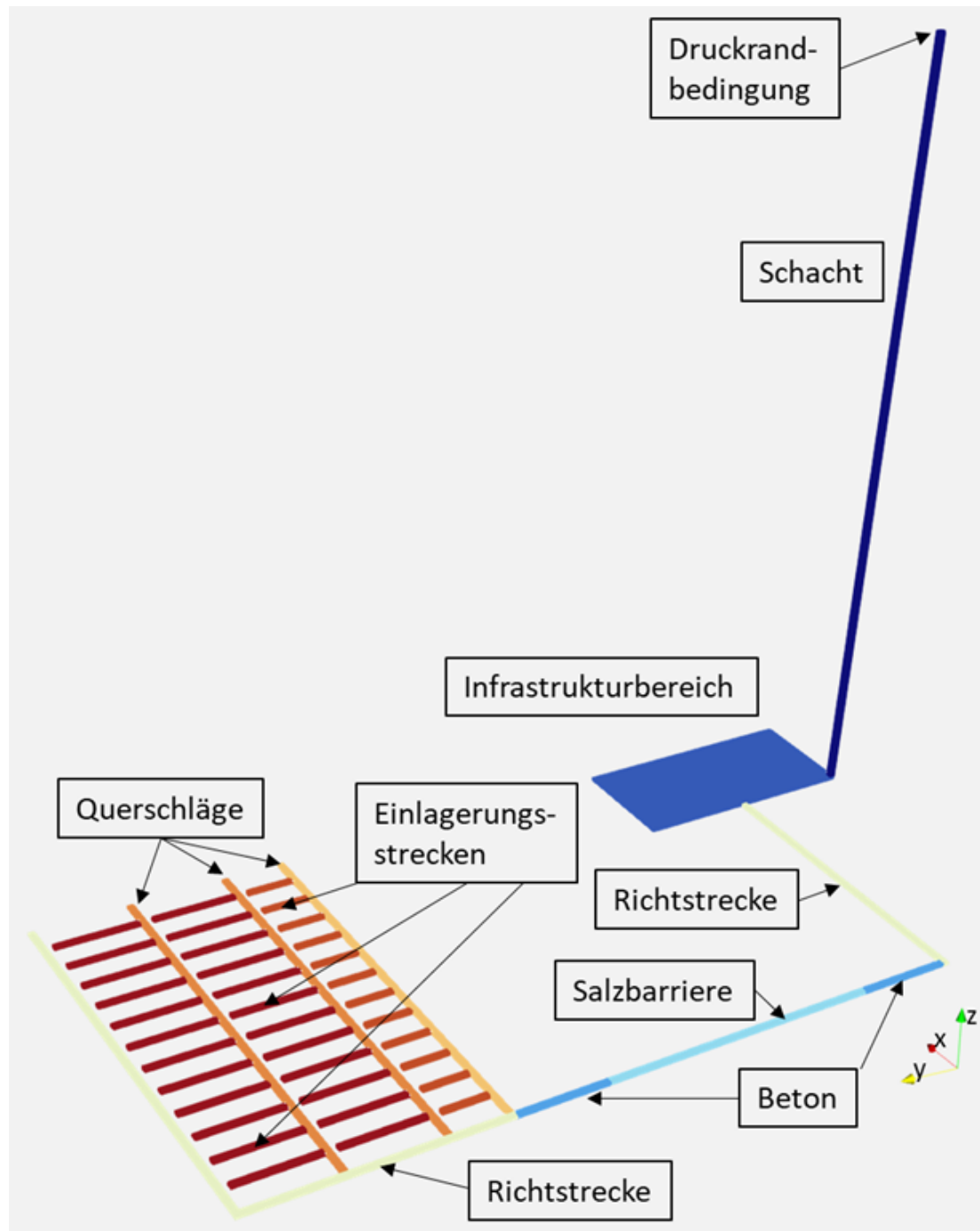


Abb. 7-1: Darstellung der unterschiedlichen Komponenten bzw. Materialgebiete (farblich hervorgehoben) des Grubenmodells (vgl. (LaForce u. a. 2024)).

Das generische Grubenmodell in Abb. 7-1 besteht aus einem Zugangsschacht und einem Infrastrukturbereich, welcher ber sog. Richtstrecken mit einem Einlage-

rungsfeld verbunden ist. Alle Richt- und Einlagerungsstrecken haben eine Breite von 7 m und eine Höhe von 4 m. Die Höhe des Schachtes beträgt von der Sohle bis zum Zugangspunkt an der Geländeoberkante 850 m, bei einem Querschnitt von 7x7 m. Die max. Ausmaße des Grubenmodells betragen in x- und y-Richtung, jeweils 455 m und 908 m. Im Einlagerungsfeld gibt es drei Streckengalerien mit jeweils 25 Einlagerungsstrecken. In den Richtstrecken zum Einlagerungsfeld befindet sich ein Barrierensystem, bestehend aus einer Salzbarriere, welche durch zwei Betonwiderlager eingespannt ist (siehe Abb. 7-1). Der Infrastrukturbereich ist mit Schotter und die restlichen Hohlräume sind mit Salzgrusversatz verfüllt (LaForce u. a. 2024). Die Vernetzung des Grubenmodells wird in Kap. 7.2 beschrieben.

Folgende Annahmen werden dem Modell zugrunde gelegt:

- Der Simulations- bzw. Betrachtungszeitraum beträgt 100.000 Jahre.
- Alle Materialien behalten ihre initialen hydraulischen Eigenschaften bzw. diese verändern sich nicht mit der Zeit.
- Für das obere Schachtende ist eine hydrostatische Randbedingung (Atmosphärendruck bei vollständiger Flüssigkeitssättigung) vorgegeben. Durch diese Randbedingung erfolgt ein gravitationsgetriebener Zufluss von Flüssigkeit in das Bergwerk.
- Die übrigen Hohlräume im Bergwerk sind initial nicht mit Flüssigkeit gesättigt, und es wird eine geringe initiale Flüssigkeitssättigung von 1 % angenommen, um zweiphasige Verhältnisse zu induzieren.
- Das umgebende Wirtsgestein ist hydraulisch dicht und deshalb im Modell nicht abgebildet, dadurch findet nur innerhalb der Hohlräume des Grubengebäudes ein Fluidtransport statt.

Für die Prozesse gelten folgende Annahmen:

- Die Modellierung erfolgt unter Zweiphasenbedingungen, d. h. es werden Kapillardruck sowie relative Permeabilitäten berücksichtigt.
- Es findet kein diffusiver Stofftransport zwischen den Phasen statt (siehe Begründung im Kap. 7.4).
- Keine Alteration oder Korrosion bzw. chemische sowie hydraulische Beeinflussung der Materialien.
- Es wird keine Gasbildung angenommen.
- Keine Berücksichtigung mechanischer Prozesse, wie z. B. Kompaktion.
- Kein Radionuklidinventar und somit kein Radionuklidtransport.
- Es werden isotherme Bedingungen angenommen.

7.2 Modellgitter

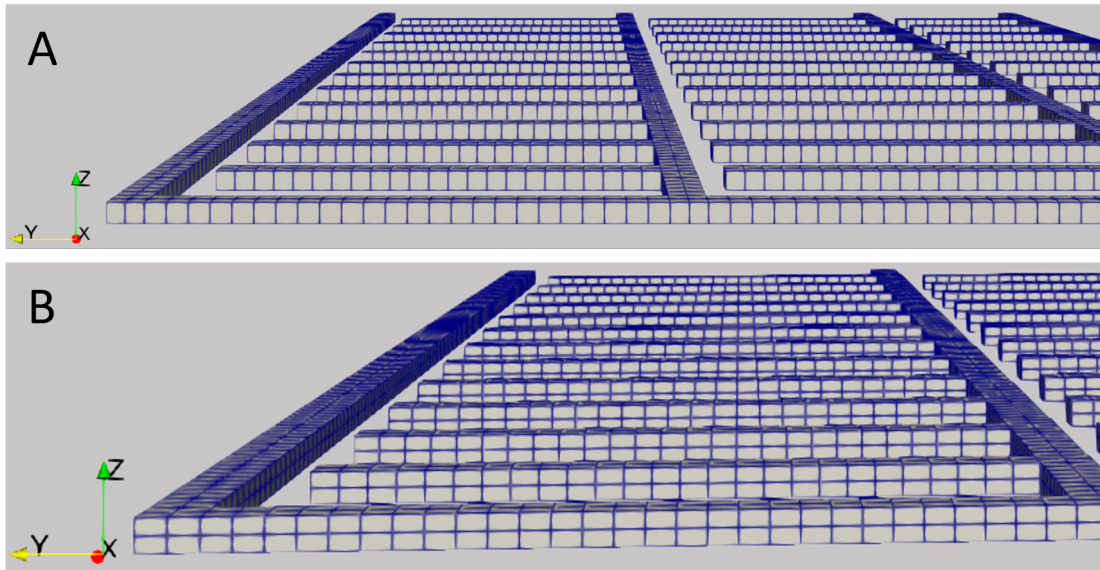


Abb. 7-2: Ausschnitt aus dem Einlagerungsbereich. Dargestellt ist das homogene (Variante-A, oben) und das vertikal unterteilte Modellgitter (Variante-B, unten).

Tab. 7-1: Parametrisierung der unterschiedlichen Materialien im Rechenmodell. Der Druck beträgt in allen Materialien 100.135 Pa, die Temperatur 25 °C.

Material	Porosität [–]	Hydr. Durchlässigkeit [m^2]	Init. Flüssigkeitssättigung [–]
Randbed. am Schacht	0,24	10^{-14}	0,99
Schacht	0,24	10^{-16}	0,35
Infrastrukturbereich	0,3	10^{-14}	0,01
Richtstrecken	0,1	$8,35 \cdot 10^{-15}$	0,01
Betonbarriere	0,13	$5,0 \cdot 10^{-17}$	0,01
Querschläge	0,1	$8,35 \cdot 10^{-15}$	0,01
Einlagerungsstrecke	0,1	$8,35 \cdot 10^{-15}$	0,01

Die Modellgeometrie, Abb. 7-1, wurde mit orthogonalen Blockelementen vernetzt. Somit wird die Voraussetzung für eine TOUGH2-konforme Modellgitterstruktur gewährleistet (vgl. (Pruess u. a. 1999)-Figure 60).

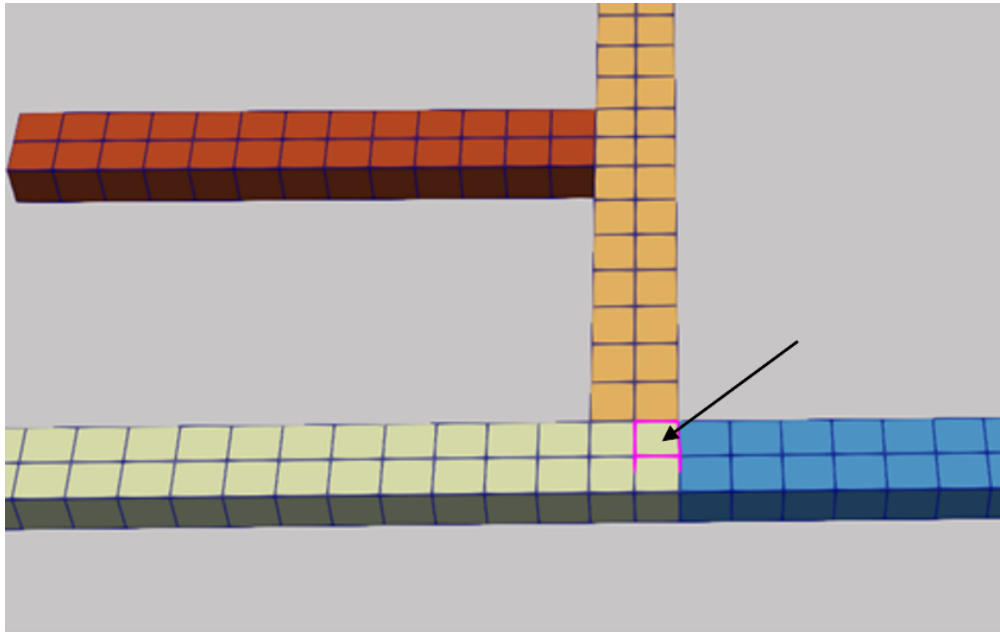


Abb. 7-3: Lage des Kontrollpunktes bzw. des Elementes (rosa umrandet) an der Schnittstelle zwischen der Richtstrecke und dem ersten Querschlag zum Einlagerungsfeld. Die Farben repräsentieren unterschiedliche Materialgebiete.

Es wurden zwei Modellvarianten erstellt. Ein in vertikaler (z-Richtung) nicht unterteiltes Modellgitter, Abb. 7-2-A), im Folgenden Variante-A genannt (Rechtecke mit einer Höhe von 4 m, einer Breite von 3,5 und einer Länge von 4 m). Zudem ein in vertikaler Richtung einmal unterteiltes Modellgitter, Abb. 7-2-B, im Folgenden Variante-B genannt. Die Abmessungen der Elemente für die Variante-B entsprechen der der Variante-A, nur mit dem Unterschied das die Höhe der Rechtecke in z-Richtung 2 m beträgt. Die verschiedenen Materialien sind gemäß Tab. 7-1 parametrisiert.

Für die Erstellung der Liniendiagramme in den folgenden Kapiteln (z. B. des Druck- und Sättigungsverlaufes) wurden die Daten an einem bestimmten Kontrollpunkt verwendet. Dieser befindet sich an der Schnittstelle zwischen der Richtstrecke und dem ersten Querschlag zum Einlagerungsfeld (rosa umrandetes bzw. markiertes Element in Abb. 7-3). Die unterschiedlichen Farben in Abb. 7-3 repräsentieren die unterschiedlichen Materialgebiete der Abb. 7-1.

Die Randbedingungen sind in PFLOTTRAN und TOUGH2-GRS etwas unterschiedlich realisiert. Für PFLOTTRAN wird eine 2D Fläche angenommen und für TOUGH2 3D Volumenelemente, mit einem Volumen von null (siehe Kap. 6.4.5). Der Unterschied hat jedoch keinen Einfluss auf die Rechnungen.

7.3 Annahmen für die Zweiphasenflussmodelle

In PFLOTTRAN können verschiedene Prozessmodule ausgewählt werden, welche die zugrundeliegenden mathematisch-physikalischen Erhaltungsgleichungen für Masse und Energie, sowie die Zustandsgleichungen (EOS) der beteiligten Phasen und Komponenten, berechnen. Für die vorliegenden Modellrechnungen und den direkten, konsistenten Vergleich mit TOUGH2-GRS, erwies sich ausschließlich das sog. GENERAL-Modul als geeignet. Die Wahl dieses Moduls ist durch die mit TOUGH2-GRS vergleichbare mathematische Formulierung zur Berechnung des gekoppelten, zweiphasigen und mehrkomponentigen Massen- und Energietransports begründet, welche von den alternativen PFLOTTRAN-Modulen, wie z. B. RICHARDS und dem WIPP-Modul nicht abgedeckt werden können (*Pflotran 2026b*).

Ein primäres Ziel der Simulationsrechnungen und des anschließenden Ergebnisvergleichs bestand im Testen bzw. Erproben des entwickelten Pre- und Postprocessings für die Simulatoren TOUGH2-GRS und PFLOTTRAN (siehe Kap. 3.1). Da die Plausibilität der physikalischen Ergebnisse hierbei eine untergeordnete Rolle einnehmen, wurde ein einfaches Modell zur Simulation des Zweiphasenflusses verwendet. Zur Berechnung des Kapillardrucks als auch für die relativen Permeabilitäten wurde ein linearer Ansatz in Abhängigkeit von der effektiven Flüssigkeitssättigung gewählt. Der Kapillardruck wird durch die lineare Funktion (siehe Gl. 7.1) auf einen Bereich zwischen einem minimalen und einem maximalen Wert linear abgebildet. Für die Testrechnungen wurde ein maximaler Kapillardruck von 10^7 Pa angenommen. Im Folgenden werden die spezifischen Parameterannahmen und Gleichungen für die beiden Simulatoren näher erläutert.

PFLOTTRAN

In PFLOTTRAN wird der lineare Kapillardruck berechnet zu (*Pflotran 2026c; Pflotran 2026b*)

$$p_c = \left(\frac{1}{\alpha} - p_c^{max} \right) s_{el} + p_c^{max} \quad (7.1)$$

mit der effektiven Flüssigkeitssättigung

$$s_{el} = \frac{p_c - p_c^{max}}{\frac{1}{\alpha} - p_c^{max}}. \quad (7.2)$$

Der Skalierungsfaktor α , entspricht dem Gaseindringdruck (*Bear 2018; Feder u. a. 2022*). Dieser wurde auf 1 gesetzt und hat somit keinen Einfluss auf die Rechnung.

Die relativen Permeabilitäten werden durch einen linearen Ansatz beschrieben

$$\begin{aligned}k_l^r &= s_{el} \\k_g^r &= 1 - s_{eg}.\end{aligned}\tag{7.3}$$

Jedes Modul, sowohl in PFLOTRAN als auch in TOUGH2-GRS, enthält spezifische Schlüsselwörter bzw. Keywords zur Auswahl von Funktionen oder zur Eingabe von Parameterwerten. Diese Keywords sind im Folgenden ebenfalls mit aufgeführt:

- Lineare Kapillardruckfunktion (Gl. 7.1, Zusammenhang zu effektiver Flüssigkeitssättigung s_{el} , Gl. 7.2): Keyword: SATURATION_FUNCTION LINEAR,
- Lineare relative Permeabilitätsfunktion gemäß Burdine (siehe Gl. 7.3): Keyword: BURDINE_LINEAR_LIQ/GAS.

TOUGH2-GRS

Die Gleichung zur Berechnung des Kapillardrucks ist in TOUGH2-GRS ähnlich zu der in PFLOTRAN und kann in (Pruess u. a. 1999) gefunden werden. Folgende Einstellungen wurden für TOUGH2-GRS gewählt:

- Lineare Kapillardruckfunktion (Keyword: ICP = 1),
- Lineare relative Permeabilität (Keyword: IRP = 1).

Für die Parametrisierung der Zweiphasenflussmodelle bzw. der Materialgebiete wurde für alle Materialgebiete eine residuale Flüssigkeits- bzw. Gassättigung $s_{res,l} = s_{res,g} = 0,001$ und ein maximaler Kapillardruck von $p_{cap}^{max} = 10^7$ Pa gewählt.

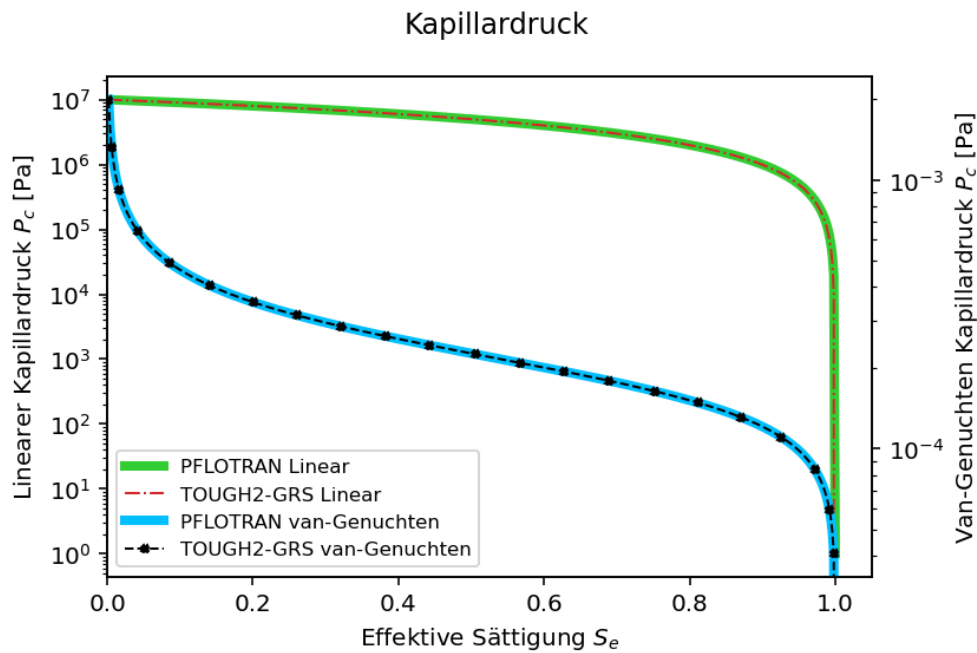


Abb. 7-4: Graphische Darstellung der linearen und der van Genuchten Kapillardruckfunktion aus PFLOTRAN und TOUGH2.

Die Abb. 7-4 zeigt den Verlauf des Kapillardruckes in Abhängigkeit von der effektiven Flüssigkeitssättigung für PFLOTRAN und TOUGH2-GRS mit den Parameterwerten aus der Tab. 7-1. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung der berechneten Kapillardrücke in beiden Programmen.

Neben dem linearen Zweiphasenflussmodell wurden weitere, in den Simulationsprogrammen verfügbare Zweiphasenflussmodelle, getestet. Der Fokus lag hierbei in der Vergleichbarkeit der Modelle zwischen den Programmen. Als Kapillardruckfunktion wurde der van Genuchten-Ansatz gewählt. Andere Funktionen konnten nicht verglichen werden, weil sie entweder in dem einen oder in dem anderen Programm nicht implementiert sind. Für den TOUGH2-GRS Parameter $CP(3)$ bzw. α (Gaseindringdruck) in PFLOTRAN der Kapillardruckfunktion, wurde ein Wert von $p_0 = 5000 \text{ Pa}$ angenommen. Für den van Genuchten Ansatz wird der Kehrwert $1/p_0$ und ein Exponent $M = 0,73$ verwendet (Kröhn u. a. 2009; Frieling u. a. 2016).

Für den van Genuchten Ansatz stehen verschiedene Funktionen für die relative Permeabilität (Gas und Flüssigkeit) zur Verfügung. Im Folgenden werden verschiedene relative Permeabilitätsfunktionen zwischen PFLOTRAN (Pflotran 2026b) und TOUGH2 (Pruess u. a. 1999) verglichen, siehe Abb. 7-5. Die gewählten Konstellationen, in Verbindung mit dem van Genuchten Ansatz, sind in der Tab. 7-2 zusammengefasst.

Tab. 7-2: Verschiedene relative Permeabilitätsfunktionen zwischen PFLOTTRAN und TOUGH2 (IRP = Steuerparameter in TOUGH2).

PFLOTTRAN
MUALEM_LINEAR_LIQ/GAS (lineare Funktion von Mualem)
BURDINE_LINEAR_LIQ/GAS (lineare Funktion von Burdine)
MUALEM_VG_LIQ/GAS (van Genuchten Ansatz von Mualem)
BURDINE_VG_LIQ/GAS (van Genuchten Ansatz von Burdine)
BURDINE_BC_LIQ/GAS (Brooks-Corey Ansatz von Burdine)
TOUGH2
Linearer Ansatz (IRP=1)
Corey Ansatz (IRP=3)

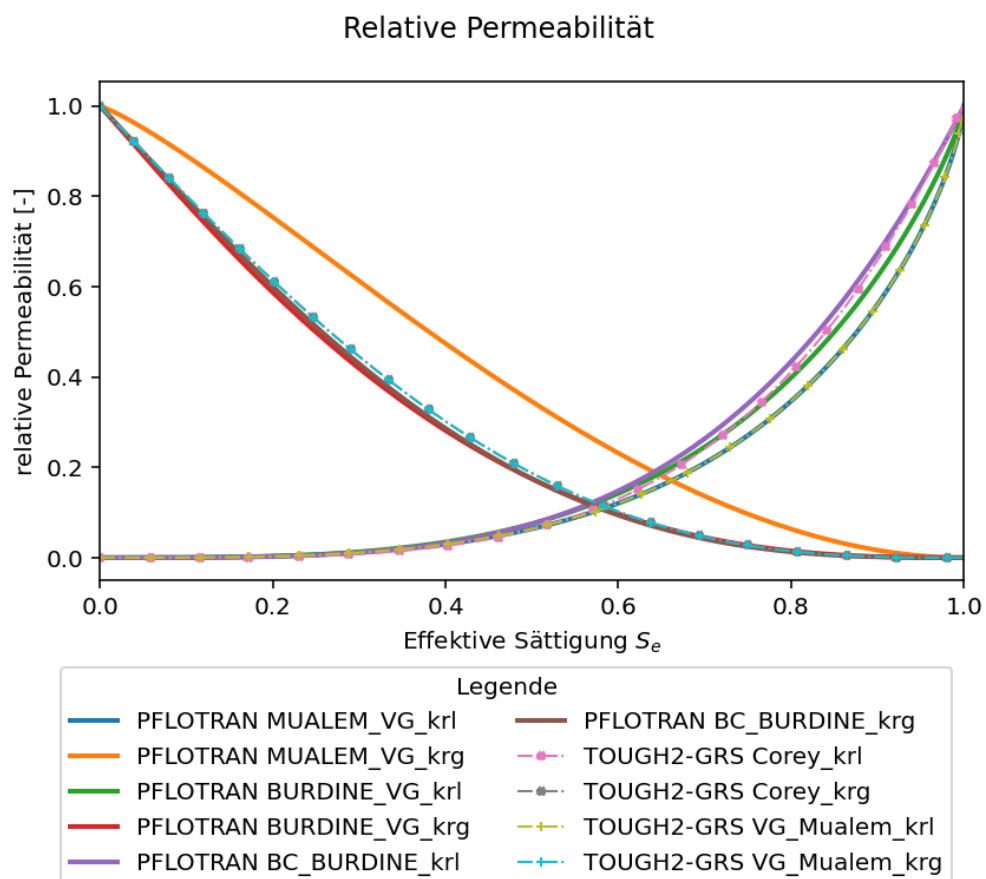


Abb. 7-5: Relative Permeabilität (krl = Flüssigkeit, krg = Gas) der verschiedenen Funktionen aus PFLOTTRAN und TOUGH2.

Die Abb. 7-5 zeigt die relativen Permeabilitätsfunktionen der Gas- und Flüssigphase basierend auf den zuvor genannten Parametern für die Zweiphasenflussmodelle. Die linearen Funktionen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen PFLOTTRAN und TOUGH2-GRS. Sie wurden jedoch zur übersichtlicheren Darstellung nicht abgebildet. Zudem zeigt sich, dass die Funktionen PFLOTTRAN BURDINE_VG und BURDINE_BC im Vergleich zu TOUGH2-GRS mit dem Corey Modell relativ gut übereinstimmen.

7.4 Unterschiede in den Simulationsprogrammen

Wie in Kap. 7.1 beschrieben, wurde in den Simulationen auf den Prozess der phasenabhängigen Diffusion verzichtet. Diese Entscheidung beruhte auf den folgenden Testrechnungen. Zu Beginn der Untersuchungen wurden Rechnungen mit phasenabhängiger Diffusion durchgeführt. In TOUGH2-GRS wurde für die relative Permeabilität der Corey- und zur Berechnung der Kapillardrücke der van Genuchten-Ansatz verwendet (Pruess u. a. 1999). In PFLOTTRAN wurden der van Genuchten-Ansatz in Kombination mit der relativen Permeabilitätsfunktion von Mualem (MUALEM_VG_LIQ/GAS) gewählt (Pflotran 2026c).

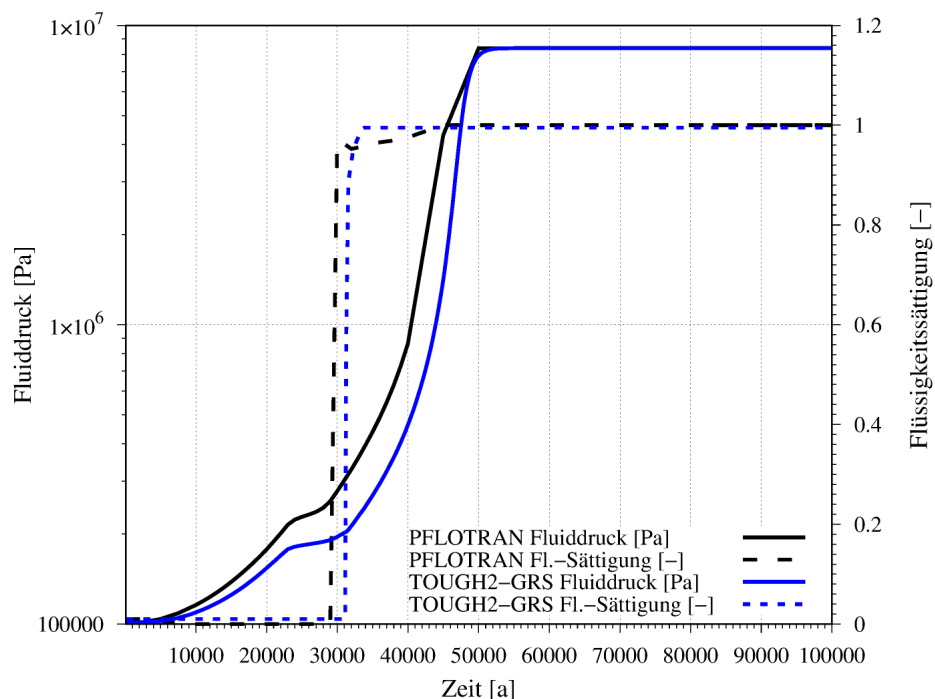


Abb. 7-6: Vergleich der Druckentwicklung (linke y-Achse, durchgehende Linien) und Flüssigkeitssättigung (rechte y2-Achse, gestrichelte Linien) für PFLOTTRAN (schwarz) und TOUGH2-GRS (blau).

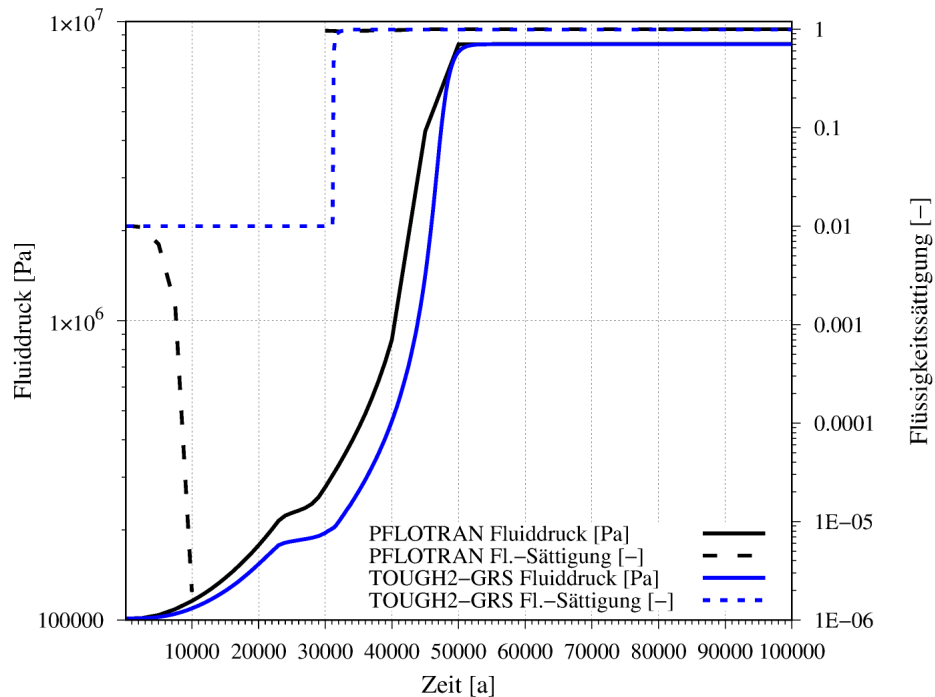


Abb. 7-7: Vergleich der Druckentwicklung (linke y-Achse, durchgehende Linien) und Flüssigkeitssättigung (rechte y2-Achse, gestrichelte Linien) für PFLOTTRAN (schwarz) und TOUGH2-GRS (blau) (die y2 Achse ist logarithmisch dargestellt).

In der Abb. 7-6 zeigt sich ein deutlicher Unterschied im zeitlichen Verlauf der Auf-sättigung mit Flüssigkeit, zwischen den beiden Programmen. Die Ergebnisse für TOUGH2-GRS zeigen am Kontrollpunkt eine langsamere Aufsättigung mit Flüssigkeit als die Ergebnisse für PFLOTTRAN. Der Fluiddruck ist bis zum Erreichen hydrostatischer Verhältnisse für TOUGH2-GRS ebenfalls geringer im Vergleich zu PFLOTTRAN. Die logarithmische Darstellung der Flüssigkeitssättigung in Abb. 7-7 verdeutlicht, dass eine starke Entsättigung der Flüssigphase stattfindet (sog. dry-out). Die Gasphase nimmt die Flüssigkeit auf und die Flüssigkeitssättigung nimmt ab. Die Lücke im Sättigungsverlauf wird durch die logarithmische Darstellung verursacht, welche keine Null-Werte darstellt (vgl. Abb. 7-7). Dieses Verhalten reduziert die Zeitschrittweiten aufgrund der hohen Gradienten und verlangsamt die Rechnung. Erst wenn bei ca. 30.000 Jahren der Flüssigkeitszustrom beginnt, erhöht sich die Sättigung wieder.

In TOUGH2-GRS besteht die Möglichkeit feste Sättigungsgrenzen einzustellen, damit ein zweiphasiger Zustand erzwungen und extreme Kapillardrücke vermieden werden, siehe Modul CNTRL in (Navarro u. a. 2018b). Ohne diese Einstellung führt der Wechsel zwischen einphasigen zu zweiphasigen Verhältnissen und umgekehrt, zu

numerischen Problemen in TOUGH2, was zu sehr kleinen Zeitschritten und schlechter Rechenperformance führt. In PFLOTTRAN kann dieses Verhalten nicht numerisch unterbunden werden. Es lag somit die Vermutung nahe, dass der unterschiedliche bzw. abweichende Druckverlauf zwischen TOUGH2-GRS und PFLOTTRAN durch die Entsättigung des Elementes in PFLOTTRAN verursacht wird.

Variationsrechnungen ohne phasenabhängige Diffusion zeigten, dass dadurch die Entsättigung der Elemente mit Flüssigkeit in PFLOTTRAN unterbunden werden kann. Aufgrund der Resultate wurde die Entscheidung getroffen, keine Diffusion zwischen den Phasen anzunehmen. Im Folgenden sind die Ergebnisse der Simulationsrechnungen aufgeführt.

7.5 Ergebnisse des linearen Kapillardruckmodells

Für die Testrechnungen bzw. die Vergleiche der beiden Simulationsprogramme, wurde zunächst das Modellgitter Variante-A verwendet (vgl. Abb. 7-2-A). Gemäß dem Workflow bzw. dem Postprocessing in Kap. 6, werden zum einen Abbildungen gewisser Bereiche des Grubengebäudes erstellt (vgl. Abb. 7-8), und es wird zunächst die zeitliche Entwicklung der Flüssigkeitssättigung über alle Elemente dargestellt. Zudem werden Linienplots erstellt, welche z. B. die zeitliche Entwicklung einzelner Variablen in einzelnen Elementen zeigen (vgl. z. B. Abb. 7-9). Die Abbildungen, welche einzelne Bereiche oder auch das gesamte Grubengebäude darstellen, werden im Folgenden als Kontinuum-Plots bezeichnet.

7.5.1 Kontinuum Plots

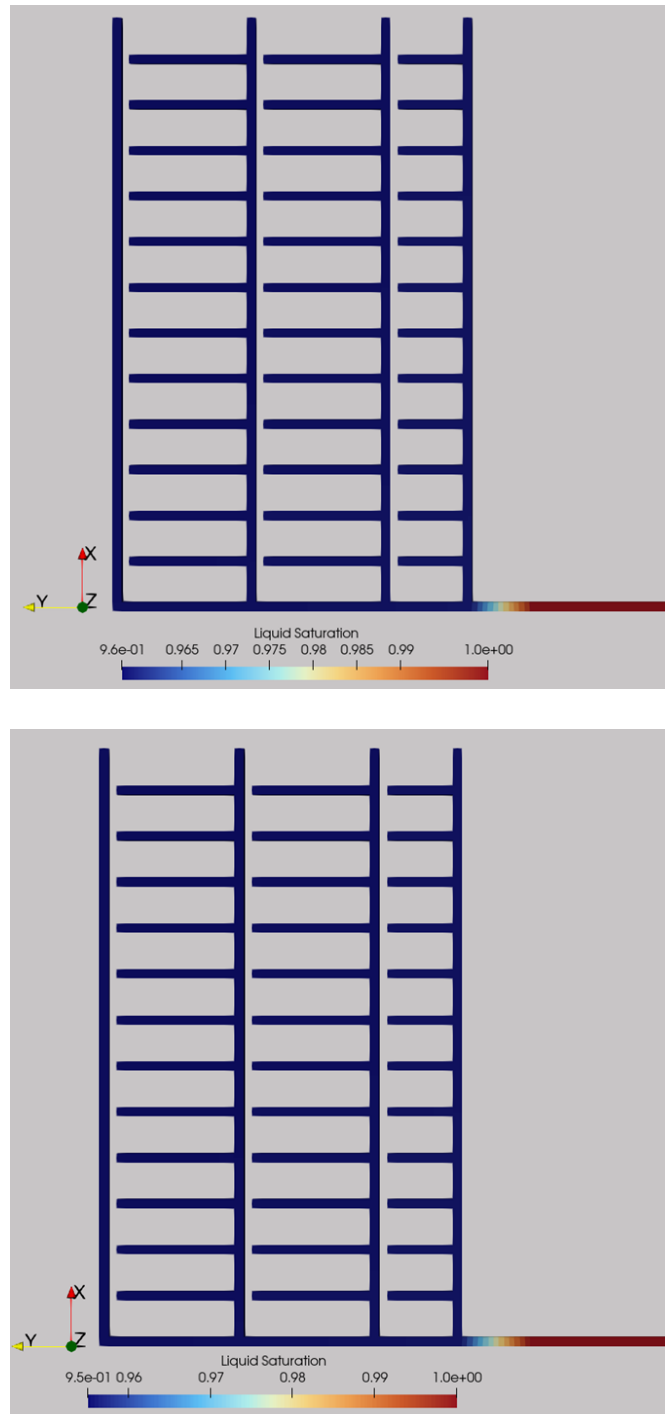


Abb. 7-8: Flüssigkeitssättigung im Einlagerungsfeld bei 30.000 Jahren, PFLTRAN (oben) und TOUGH2 (unten). Der Sättigungsgrad wird farblich dargestellt durch 0 in blau und 1 in rot.

Die Abb. 7-8 zeigt einen Vergleich der Simulationsergebnisse der beiden Programme PFLOTRAN (Abb. 7-8 oben) und TOUGH2-GRS (Abb. 7-8 unten). Dargestellt ist die Flüssigkeitssättigung zum Zeitpunkt 30.000 a. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung der Aufsättigung mit Flüssigkeit zwischen den Programmen. Eine rein visuelle Auswertung der Ergebnisse in Abb. 7-8 ist nicht zielführend, da die Interpretation von Farbverläufen subjektiven Einflüssen unterliegen kann. Jedoch gibt die Auswertung einen ersten Überblick über das hydraulische Verhalten des Gesamtsystems. Für eine genauere Analyse müssen Linienplots bzw. Zeitverläufe der Zustandsvariablen und Flüsse spezifischer Elemente erstellt werden (siehe folgendes Kap. 7.5.2).

7.5.2 Zeitliche Entwicklung Fluiddruck vs. Flüssigkeitssättigung

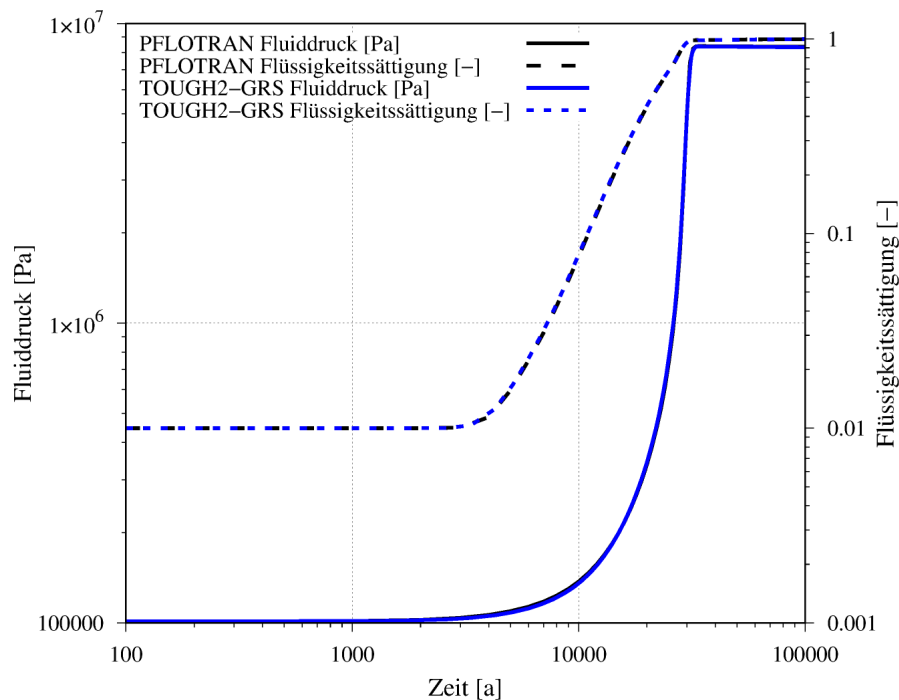


Abb. 7-9: Vergleich der Druckentwicklung (linke y-Achse, durchgehende Linien) und Flüssigkeitssättigung (rechte y2-Achse, gestrichelte Linien) für PFLOTRAN (schwarz) und TOUGH2-GRS (blau)

Die Abb. 7-9 vergleicht die Zulaufphase bzw. die zeitliche Entwicklung der Flüssigkeitssättigung (rechte y2-Achse, gestrichelte Linien) und die damit einhergehende Entwicklung des Fluiddruckes (linke y-Achse, durchgehende Linien). Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen TOUGH2-GRS (blau) und PFLOTRAN (schwarz) am genannten Kontrollpunkt. Auf der Endlagersohle ergibt sich ein hydrostatischer Druck von $8,329 \cdot 10^6$ Pa. Die Resultate für weitere Kontrollpunkte, zwischen dem Schacht und dem Referenz-Kontrollpunkt, ergaben ebenfalls gute Übereinstimmung.

gen (nicht dargestellt).

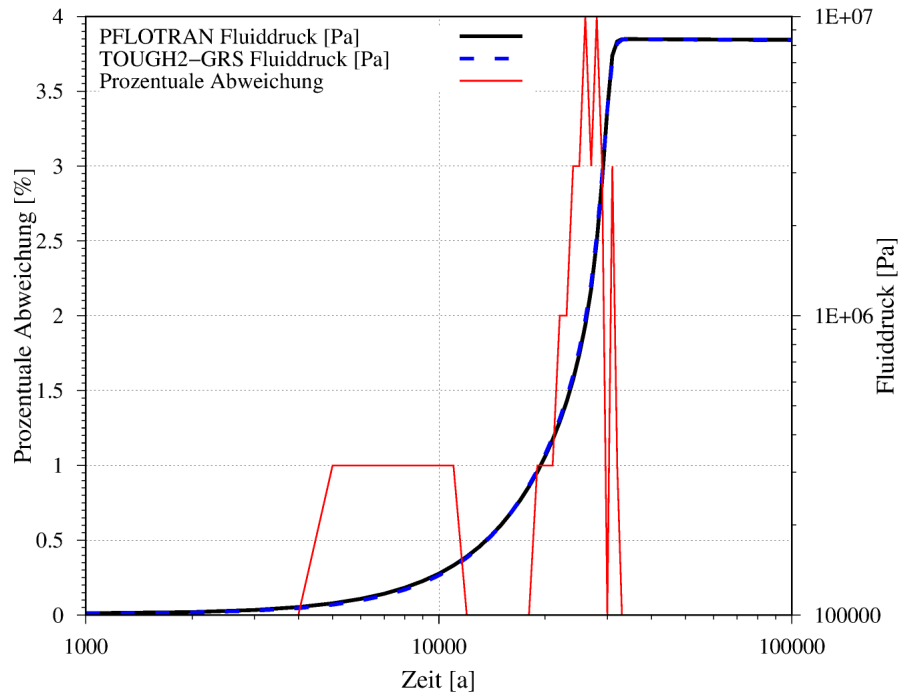


Abb. 7-10: Prozentuale Abweichung (y-Achse, rot) des Fluiddruckes zwischen TOUGH2-GRS und PFLOTRAN. Der Fluiddruck im Kontrollpunkt ist auf der y2-Achse dargestellt.

Um den zahlenmäßigen absoluten Unterschied bzw. die Abweichung der Rechenergebnisse zwischen den Simulationsprogrammen zu untersuchen, können sog. Differenzplots erstellt werden. In der Abb. 7-10 ist die prozentuale Abweichung des Fluiddruckes zwischen den beiden Rechenprogrammen für den Kontrollpunkt dargestellt. Während der Zulauf- bzw. Aufsättigungsphase zeigen sich relative Abweichungen von max. 4 %.

7.5.3 Zeitliche Entwicklung Kapillardruck vs. Flüssigkeitssättigung

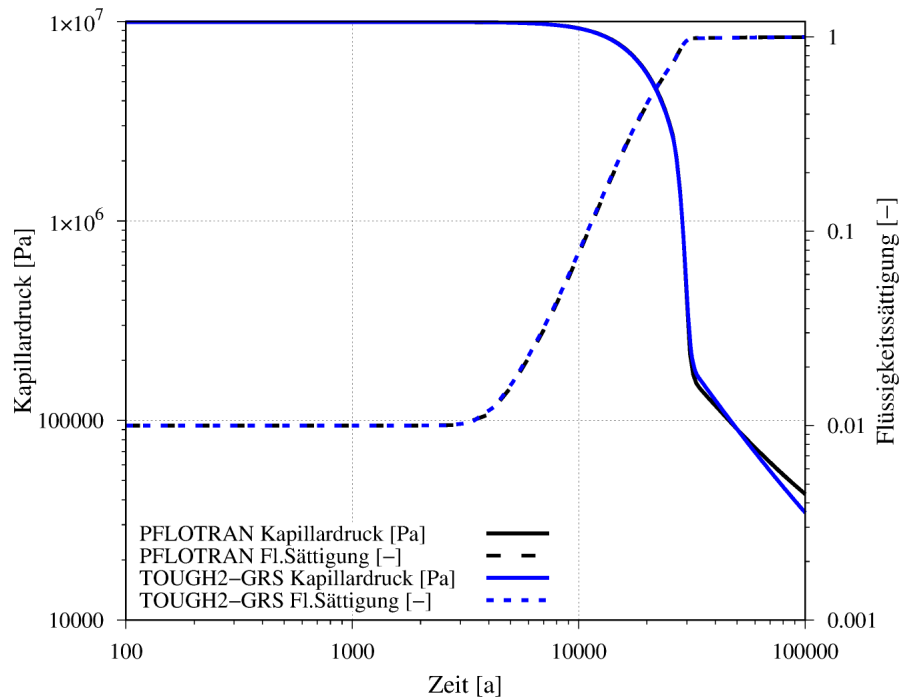


Abb. 7-11: Kapillardruckentwicklung (linke y-Achse, durchgehende Linien) und Flüssigkeitssättigung (rechte y2-Achse, gestrichelte Linien) zwischen PFLOTTRAN (schwarz) und TOUGH2-GRS (blau).

Der Kapillardruck wird in Abhängigkeit von der effektiven bzw. residualen Flüssigkeitssättigung, von einem maximalen Wert entsprechend 10^7 Pa bis zu einem minimalen Wert linear berechnet (vgl. Abb. 7-4). Wenn die Flüssigkeitssättigung am Messpunkt bei ca. 3.000 Jahren steigt, sinkt gleichzeitig der Kapillardruck linear bis der Porenraum mit Flüssigkeit gesättigt ist (vgl. Abb. 7-11).

Bereits bei der initialen Sättigung von 1 % liegt der maximale Kapillardruck von 10^7 Pa, aufgrund der linearen Beziehung, nahezu an ($P_c = 9,909910$ Pa). Aufgrund der logarithmischen Darstellung wird der Unterschied in Abb. 7-11 nicht ersichtlich. Zudem fällt der Kapillardruck bei voller Flüssigkeitssättigung (siehe schwarze gestrichelte Linie in Abb. 7-11) nicht auf null ab, sondern die Kurve flacht nur ab. Dieses Verhalten ist bei beiden Programmen gleich.

7.6 Variation der Zweiphasenflussansätze

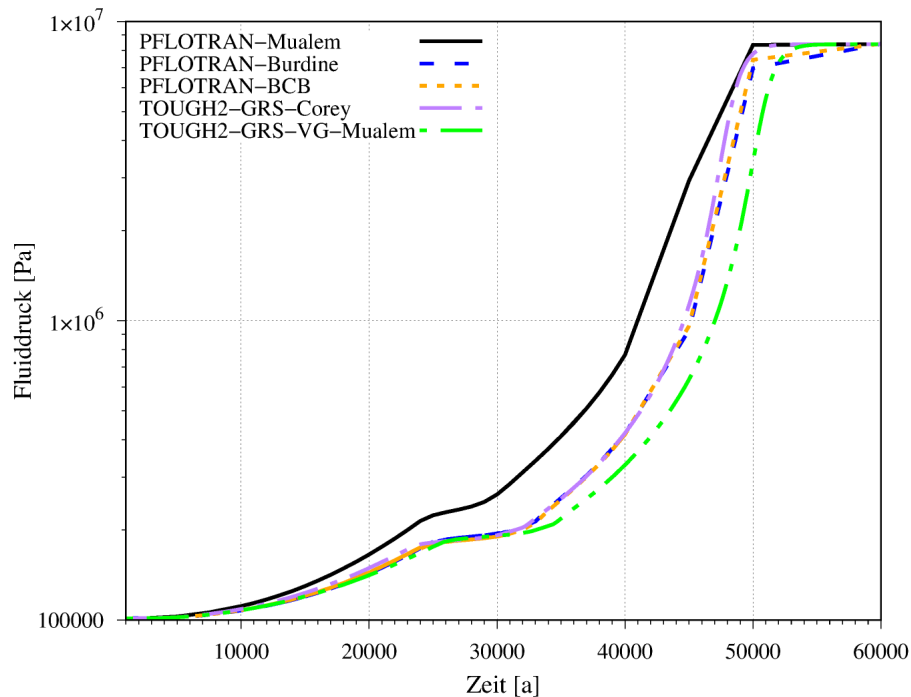


Abb. 7-12: Vergleich des Fluiddruckes der verschiedenen Zweiphasenflussmodelle zwischen PFLOTRAN und TOUGH2-GRS, mit der rel. Permeabilitätsfunktion von Mualem, Burdine und Brooks-Corey-Burdine (BCB) in PFLOTRAN und der rel. Permeabilitätsfunktion gemäß Corey und van Genuchten-Mualem in TOUGH2-GRS. Alle Modelle wurden in Verbindung mit der van Genuchten Kapillardruckfunktion getestet.

Zur Untersuchung des Einflusses der Zweiphasenflussmodelle auf den Fluidfluss wurden weitere Modelle getestet (vgl. Tab. 7-2). Die Rechnungen wurden ebenfalls mit dem Modellgitter Variante-A (vgl. Abb. 7-2) und auf Grundlage der Daten in Tab. 7-1 erstellt. Die relativen Permeabilitätsfunktionen gemäß Mualem in PFLOTRAN und van Genuchten-Mualem in TOUGH2-GRS weichen von den vorherig genannten Funktionen etwas ab. Zur übersichtlicheren Darstellung zeigt die Abb. 7-12 nur die Zeitspanne von 1.000 bis 60.000 Jahren.

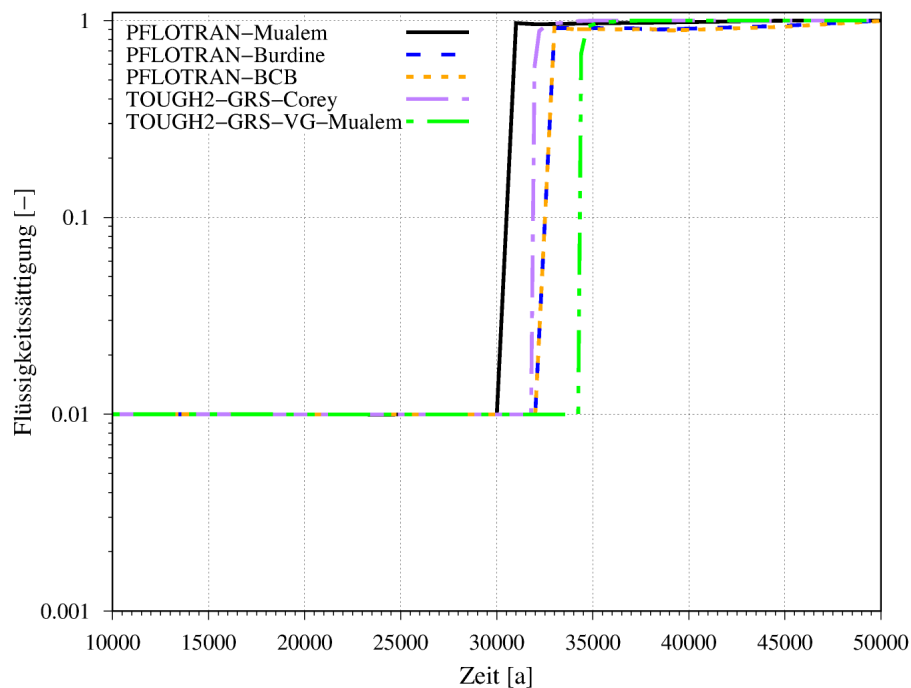


Abb. 7-13: Vergleich der Flüssigkeitssättigung der verschiedenen Zweiphasenflussmodelle zwischen PFLOTTRAN und TOUGH2-GRS, mit der rel. Permeabilitätsfunktion von Mualem, Burdine und Brooks-Corey-Burdine (BCB) in PFLOTTRAN und der rel. Permeabilitätsfunktion gemäß Corey und van Genuchten-Mualem in TOUGH2-GRS. Alle Modelle wurden in Verbindung mit der van Genuchten Kapillardruck-funktion getestet.

Die in Abb. 7-13 dargestellte Entwicklung der Flüssigkeitssättigung für die verschiedenen rel. Permeabilitätsfunktionen bestätigt bzw. verdeutlicht die Ergebnisse der Abb. 7-12. Der Beginn der Aufsättigung mit Flüssigkeit beginnt bei der Mualem Funktion in PFLOTTRAN früher und für die van Genuchten-Mualem Funktion in TOUGH2 später im Vergleich zu Burdine und Brooks-Corey-Burdine in PFLOTTRAN und Corey in TOUGH2.

Die Ursache für die Unterschiede zwischen den Funktionen in den Abb. 7-12 und Abb. 7-13, kann durch die Umsetzung bzw. wie die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung und die relative Permeabilität mathematisch verknüpft sind, erklärt werden. Jede Funktion, sowohl für den Kapillardruck, als auch in Verbindung mit der rel. Permeabilität, wurde für bestimmte Fluide (z. B. Öl, Wasser oder Luft) und poröse Materialien (z. B. Sand oder Ton) abgeleitet.

Diese Unterschiede verdeutlichen die Notwendigkeit einer kritischen Evaluierung von konzeptionellen Modellen und Materialfunktionen hinsichtlich ihrer Eignung für die jeweilige spezifische hydrogeologische Fragestellung. Darüber hinaus zeigt sich,

dass mathematisch ähnlich benannte Modelle oder konstitutive Beziehungen in unterschiedlichen Simulatoren (wie TOUGH2-GRS und PFLOTTRAN) aufgrund abweichender interner Implementierungen, Skalierungen oder Definitionsbereiche nicht ohne Weiteres direkt miteinander vergleichbar sein können. Für Code-Verifikationen und Benchmark-Studien ist daher eine detaillierte Analyse der zugrundeliegenden Quellcodes und Parametrisierungen zwingend erforderlich.

7.7 Vergleich Modellgittervariante-A und Variante-B

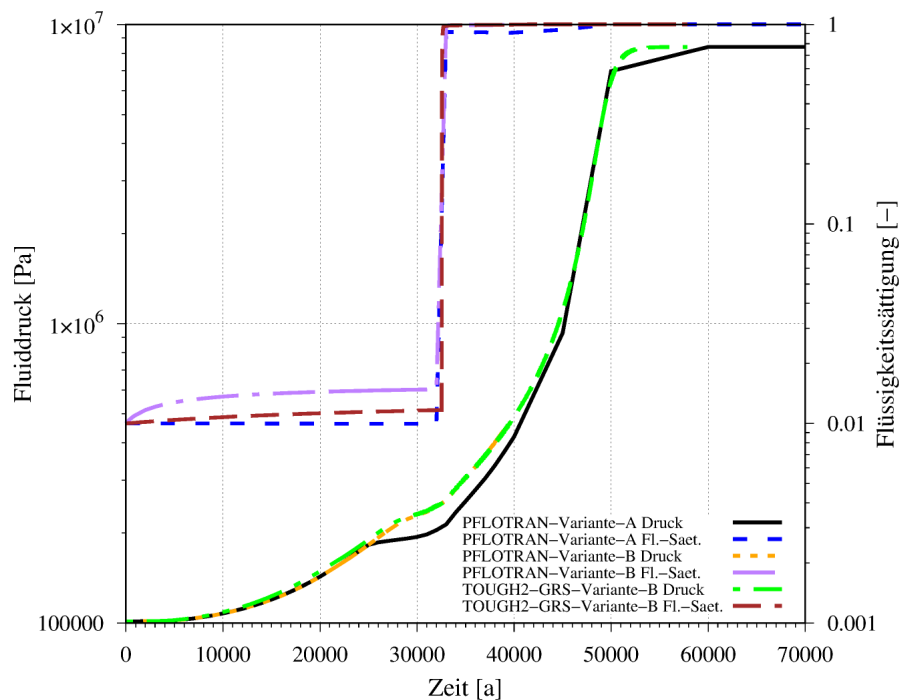


Abb. 7-14: Vergleich der Druckentwicklung (linke y-Achse) und Flüssigkeitssättigung (rechte y2-Achse) zwischen der Modellgittervariante A und B für PFLOTTRAN und TOUGH2-GRS.

Die Abb. 7-14 zeigt den Vergleich der Simulationsergebnisse für die Modellgittervariante A, Abb. 7-2-a, mit der Modellgittervariante B, Abb. 7-2-B. Die Rechnungen wurden mit der Kapillardruckfunktion gemäß van Genuchten mit den rel. Permeabilitätsfunktionen Burdine in PFLOTTRAN und Corey in TOUGH2-GRS durchgeführt. Anzumerken ist, dass die Rechnungen für die Modellvariante-B nicht beendet wurden, weil die Zeitschrittweiten zu weit herunter geregelt wurden. Zurzeit sind in beiden Programmen keine Performancerechnungen mit dem vertikal unterteilten Gitter möglich.

Die Abb. 7-14 zeigt eine gute Übereinstimmung in der Zulaufphase bzw. Aufsättigung mit Flüssigkeit (rechte y2-Achse) und der damit einhergehenden Druckentwicklung (linke y-Achse) zwischen TOUGH2-GRS und PFLOTTRAN am Kontrollpunkt. In der Modellvariante-B steigt im Gegensatz zur Variante-A (vgl. Abb. 7-6) zu Beginn die Flüssigkeitssättigung leicht an. Der Messpunkt liegt in der Modellvariante-B auf der Sohle der Richtstrecke. Der mobile Flüssigkeitsanteil sinkt aufgrund der Schwerkraft vom oberen zum unteren Element ab und die Sättigung steigt im unteren Element leicht an.

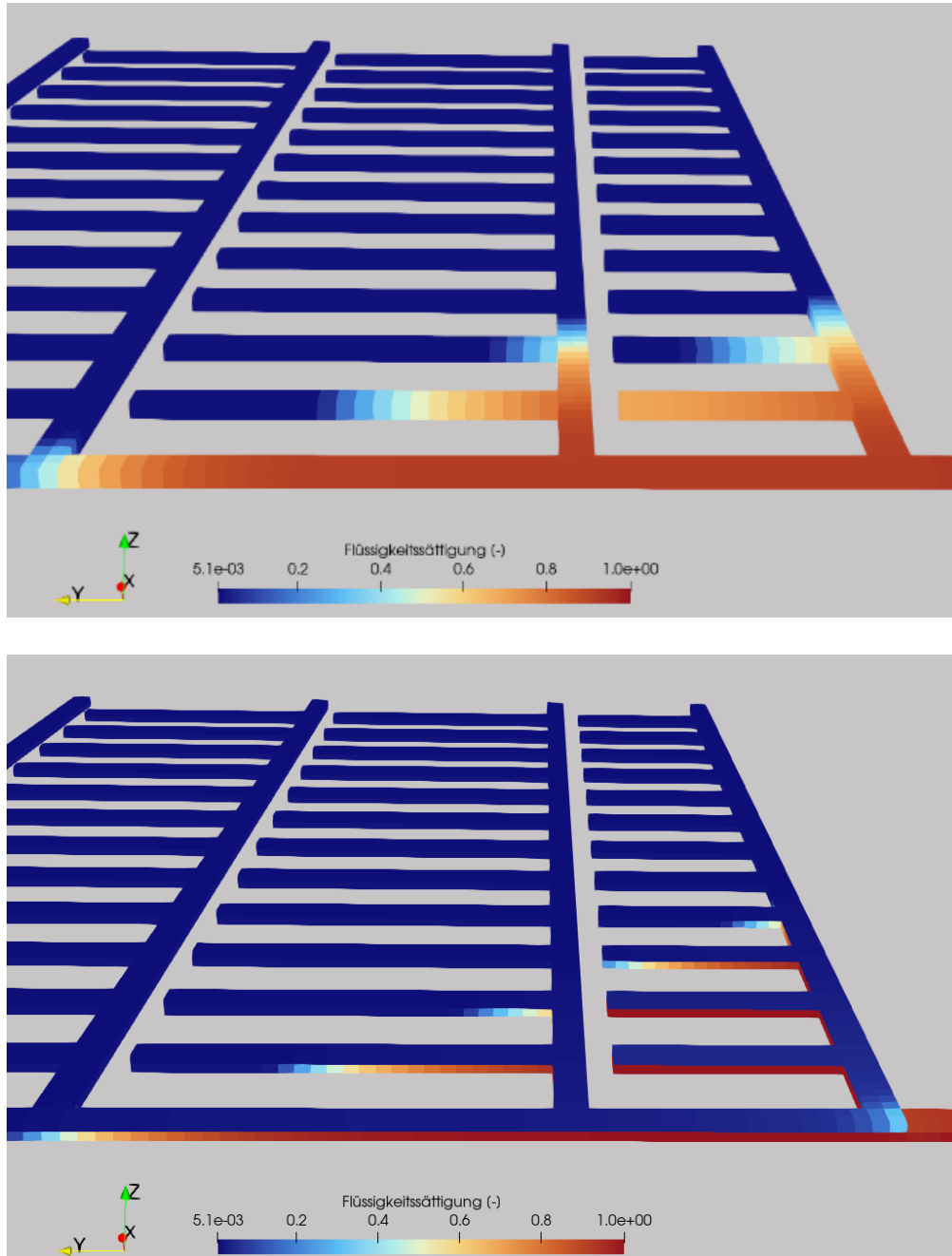


Abb. 7-15: Flüssigkeitssättigung im Einlagerungsfeld bei 34.000 Jahren, PFLOTTRAN (Variante-A, oben) und (Variante-B, unten). Der Sättigungsgrad wird farblich dargestellt durch 0 in blau und 1 in Rot.

Zur Veranschaulichung ist die Flüssigkeitssättigung zum Zeitpunkt 34.000 Jahre für die PFLOTTRAN Rechnung Variante B im Kontinuum Plot dargestellt (Abb. 7-15, unten). Es zeigt sich, dass eine Separierung der Phasen für das obere und untere Element für die Variante B stattfindet. In der Variante A sind die Phasen homogen verteilt (Abb. 7-15, oben).

7.8 Resümee und Zusammenfassung

Der Vergleich zwischen PFLOTTRAN und TOUGH2-GRS zeigt, dass das Pre- und Postprocessing bzw. der Workflow zur Generierung der Rechenfälle (vgl. Kap. 6) und der Auswertung der Ergebnisse gut funktionieren. Auch wenn die Plausibilität der Simulationsergebnisse nicht im Fokus stand, zeigt der Vergleich zwischen beiden Rechenprogrammen eine gute Übereinstimmung. Mit Bezug zur Variation der Zweiphasenflussmodelle zeigt sich, dass trotz gleicher Eingabeparameter und Modelle unterschiedliche Ergebnisse erzielt werden. Nachfolgende Arbeiten sollten den Vergleich bzw. die Variation der Zweiphasenflussmodelle weiter untersuchen, um das Verständnis für die Ursachen dieser Unterschiede zu vertiefen. Ein solches Verständnis trägt insgesamt zu einem höheren Verständnis der Rechenprogramme bei und stärkt damit das Vertrauen in die Ergebnisse und deren Interpretation.

Ein Vergleich von Rechenprogrammen dient zusätzlich einer Plausibilitätsprüfung der verwendeten Modelle und Eingabeparameter. Obwohl auch angemerkt werden muss, dass Trotz eines vereinheitlichten Pre- und Postprocessings bedeutet die gleichzeitige Bearbeitung der Rechenmodelle für zwei Programme einen deutlichen Mehraufwand. Dies verdeutlicht jedoch gleichzeitig auch die direkte Relevanz eines zum Teil automatisierten und zwischen den Programmen abgestimmten Pre- und Postprocessing.

8 Geochemische Modellierungen im Rahmen des Mont Terri BN-Experimentes

Torben Weyand

Bei den in diesem Kapitel beschriebenen Ergebnissen handelt es sich um eine zusammenfassende Darstellung. Fachliche Einzelergebnisse werden in *Weyand u. a. (2026)* publiziert.

8.1 Zielstellung

Als Anwendungsbeispiel für geochemische Modellierungsarbeiten dient im Folgenden das BN-Experiment („**Bitumen-Nitrate-Clay Interaction**“) aus dem Felslabor Mont Terri (*swisstopo 2021*) im Tonstein, mit dem das BASE im Juli 2019 die Zusammenarbeit aufgenommen hat (*BfE 2019*). Im Mittelpunkt des BN-Experiments steht das Reaktionsverhalten und der Transport von Nitrat sowie organischen Bestandteilen, die in radioaktiven Abfällen enthalten sein können. Diese stammen z. B. aus der Zersetzung von Bitumen, das für die Fixierung radioaktiver Abfälle verwendet wurde. Untersucht werden die damit verbundenen biogeochemischen Auswirkungen auf das Nahfeld eines im Tongestein gelegenen Endlagers für radioaktive Abfälle. Hierzu gehört insbesondere der Einfluss oxidierender Komponenten auf das Reduktionsvermögen von Tonstein. Im Felslabor werden hierfür in einem Bohrloch Injektionen mit Zusätzen von Nitrat, Selenat und/oder Elektronendonatoren durchgeführt.

In diesem Kontext wird auch das Transportverhalten von redoxsensitiven Radionukliden (aktuell am Beispiel inaktiver Selenverbindungen) untersucht, da in Langzeitsicherheitsanalysen eines Endlagers für radioaktive Abfälle im Tonstein das Radionuklid ^{79}Se einen wesentlichen Beitrag zur Dosis liefern kann (*Grambow 2008; Navarro u. a. 2019; H. Li u. a. 2022; De Cannière u. a. 2010*). Die Mobilität von Selen ist von dessen Oxidationsstufe abhängig (z. B. ist Se(VI) mobiler als Se(0)) und durch mikrobielle Aktivität kann sich diese Oxidationsstufe ändern (*Bleyen u. a. 2021*). Daher ist das BN-Experiment für die Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen für das BASE von Interesse.

Im BN-Experiment wurden bislang im Bohrloch Injektionslösungen mit einem nahezu neutralen pH-Wert verwendet (*Bleyen u. a. 2017; Bleyen u. a. 2019*). In Zukunft soll im BN-Experiment der Einfluss eines erhöhten pH-Wertes auf den Verbleib von Nitrat bzw. Selenat im Tonstein untersucht werden. Ein alkalisches Milieu kann in einem

Endlager zum Beispiel dadurch entstehen, dass Beton als Barriere- und Verschlussmaterial verwendet wird. Die Erhöhung des pH-Werts soll im Experiment langsam und schrittweise erfolgen, damit sich die mikrobielle Population an die geänderten Umweltbedingungen anpassen kann.

Das BASE führt im Rahmen des BN-Experimentes Modellierungsaufgaben im Bereich Geochemie durch. Es werden geochemische Berechnungen durchgeführt, um die Experimente zur Erhöhung des pH-Werts im Bohrloch vorzubereiten und auszuwerten. Ein Ziel ist es, vorherzusagen, ob es zu Ausfällungen von Mineralen bzw. Festphasen in den Wasserleitungen des Experiments kommen kann. Dazu werden verschiedene Rechenfälle mit unterschiedlichen Randbedingungen modelliert (z. B. verschiedene Arten von Injektionslösungen, die zu einer pH-Wert-Erhöhung führen). Ebenfalls werden die geochemischen Wechselwirkungen mit dem umgebenden Tonstein berücksichtigt. Dies geschieht durch die Betrachtung geochemischer Prozesse (z. B. Kationenaustausch) in einzelnen Rechenfällen, deren Ergebnisse verglichen werden, um die Auswirkung auf Mineralausfällungen und -auflösungen insgesamt zu analysieren.

Schwerpunkt zur Unterstützung des BN-Experimentes¹¹ ist daher die Untersuchung mittels Modellrechnungen inwiefern sich der pH-Wert im Tonstein infolge von zutretenden Lösungen ändert. Infolgedessen können Mineralumwandlungen stattfinden, die zu einer Veränderung des Porenraumes und somit des Transportregimes führen können. Zum Einsatz kommt der Code PHREEQC (*Parkhurst u. a. 2013*), mit welchem die jeweiligen thermodynamische Gleichgewichte berechnet und die Lösung bzw. Ausfällung von Festphasen berechnet werden.

8.2 Projektverlauf

Die Projektleitung für das BN-Experiment hat das belgische Studienzentrum für Kernenergie (SCK CEN) inne. Im Rahmen dieses Experiments findet eine regelmäßige Veranstaltungsreihe (Mont Terri Technical Discussions) statt, in welcher die neuesten Ergebnisse der Projektpartner (neben SCK CEN und BASE sind dies Andra, ASNR, FANC und BRGM ¹²) ausgetauscht und diskutiert werden. Federführend ist hier SCK CEN, die überwiegend das experimentelle chemische und mikrobiologische

¹¹Das BASE ist dort durch das Projekt *Mont Terri Project- BN Experiment: Bitumen-Nitrate-Clay interaction* (FKZ 4724F70102) beteiligt.

¹²Andra - Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs; ASNR - L'Autorité de sûreté nucléaire et de radioprotection; FANC - Het Federaal Agentschap voor Nucleaire Controle; BRGM - Bureau de recherches géologiques et minières.

Programm durchführen und bei mineralogischen Untersuchungen von BRGM unterstützt werden. Am 26. Januar 2022 wurde auf der Mont Terri Technical Discussion TD-435 die Unterstützung durch das BASE mittels geochemischer Modellrechnungen angekündigt (*Jendras u. a. 2022*).

In einem ersten Ansatz wurde damit begonnen, ein geochemisches Modell mit dem Programm PHREEQC (*Parkhurst u. a. 2013*) in der Version 3.7.3. (*Parkhurst u. a. 2021*) zu erstellen. Grundlage von geochemischen Modellrechnungen sind thermodynamische Daten, insbesondere die Gleichgewichtskonstanten chemischer Reaktionen (sog. log k-Werte), die verwendet werden um Sättigungsindizes (Verhältnis zwischen Ionenaktivitätsprodukt und Löslichkeitsprodukt) zu berechnen und somit die potentielle Ausfällung und Auflösung von Festphasen zu quantifizieren und das thermodynamische Gleichgewicht zu bestimmen. Dieses Modell verwendete den thermodynamischen Datensatz ThermoChimie in der Version 11a (*ThermoChimie 2022*), der für Fragestellungen in der Endlagerung im Tonstein fortlaufend entwickelt wird.

Mit diesem Modell wurden die chemischen Reaktionen in Lösung zwischen zwei Komponenten berechnet und bestimmt, welche Minerale und Feststoffe durch die chemische Reaktion in Übersättigung vorliegen, d.h. aus der Lösung als Feststoff ausfallen könnten. Die zwei Komponenten sind:

1. Ein Liter Lösung mit der chemischen Zusammensetzung eines synthetischen Porenwassers (*Bleyen u. a. 2021*), das im chemischen Gleichgewicht mit dem Opalinuston in Mont Terri sein soll (*Pearson u. a. 2003*).
2. Eine alkalische Natronlauge (NaOH), die schrittweise mit dem synthetischen Porenwasser reagiert, um den pH Wert (bis auf 13) ansteigen zu lassen.

Bei den Arbeiten wurde sich zunächst auf die chemischen Reaktionen zwischen diesen beiden Komponenten und den daraus resultierenden Ausfällungen von Mineralen und Feststoffen konzentriert und Wechselwirkungen mit dem Opalinuston vernachlässigt. Dies bedeutet, dass hier der Einfluss der pH Wert Erhöhung innerhalb eines geschlossenen Systems (z.B. innerhalb des Rohrsystems im Experiment) anhand einer synthetischen Porenwasserzusammensetzung untersucht wurde. Die Ergebnisse hierzu wurden im Januar 2023 am Mont Terri Technical Meeting TM-40 als Poster (*Weyand u. a. 2023b*) und in der Mont Terri Technical Discussion als Vortrag präsentiert (*Weyand u. a. 2023a*). Es wurden auch Variationsrechnungen durchgeführt, die anstatt des synthetischen Porenwassers die chemische Zusammensetzung der drei Bohrlochkammern berücksichtigen (*Hendrix u. a. 2022*).

Im Anschluss und auf Basis der Diskussionen innerhalb der beiden Veranstaltungen erfolgten weitere kleinere Anpassungen im Modell, die Eingang in eine Posterpräsentation im April 2023 auf der EGU General Assembly gefunden haben (Weyand u. a. 2023c), wie z.B.

- Aktualisierung des thermodynamischen Datensatzes auf die neue Version 12a (ThermoChimie 2023; Rodríguez u. a. 2023),
- Auswertung der Temperaturmessreihen im Bohrloch (veröffentlicht in Weyand u. a. (2026)) und Berücksichtigung von Temperaturabhängigkeiten (anstelle der Standard-Temperatur von 25 °C) bei den chemischen Reaktionen und bei den Eingabewerten (insb. Speziationbetrachtung des gelösten Kohlenstoffes),
- Erweiterung mittels Analogien um nicht im Bohrlochwasser gemessene, aber natürlich vorkommender Ionen (Aluminium und Silizium).

Das Modell wurde außerdem hinsichtlich geochemischer Interaktionen mit dem Opalinuston, mit dem das Bohrlochwasser im in-situ Experiment in Kontakt steht, erweitert. Hierzu gehört neben Karbonatgleichgewichten insbesondere der Kationenaustausch mit Tonmineralen. Die Ergebnisse hierzu wurden auf der Mont Terri Technical Discussion TD-482 im Januar 2024 als Vortrag (Weyand u. a. 2024a) und auf dem Mont Terri Technical Meeting TM-41 im Mai 2024 als Poster (Weyand u. a. 2024b) präsentiert.

Im Anschluss wurden im Juni 2024 vom Betreiber des Felslabors Mont Terri „Bundesamt für Landestopografie (swisstopo)“ im Bohrloch des BN Experiments neue Wasserproben entnommen, die von SCK CEN im wasserchemischen Nasslabor analysiert wurden (SCK-CEN 2024). Die Modellierungsarbeiten wurden bezüglich der neuen wasserchemischen Analysen aktualisiert. Weiterhin wurden die folgenden Modellerweiterungen durchgeführt:

- Ausschluss von (insbesondere) karbonatischen Festphasen, die kinetisch gehemmt sind bzw. eine größere Aktivierungsenergie benötigen als bei den in-situ Temperaturbedingungen in Mont Terri gegeben,
- Modellierung der Ausfällung von Zementphasen (C-S-H Phasen),
- Aktualisierung der Tonsteinparameter (Wersin u. a. 2024)
- und beispielhafte Modellierung der Auflösung von Tonmineralen (kinetisch gesteuert).

Die Kinetik von Tonmineralen wurde nicht abschließend in das Modell integriert. Zum einen, weil die Unsicherheiten bzgl. der Datengrundlage zu groß sind, dass die Aussagekraft der Modellergebnisse nur bedingt nutzbar wäre und zum anderen, weil im in-situ Experiment noch nicht festgelegt ist, inwiefern die pH-Wert Erhöhung

erfolgen soll (Art und Weise sowie zeitlich). Die Modellergebnisse hierzu wurden im September 2024 als Vortrag innerhalb einer Mont Terri Technical Discussion (Weyand 2024) sowie als Poster im November 2024 auf der „9th International Conference on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement (Clay Conference) 2024“ (Weyand u. a. 2024c) präsentiert.

Im Anschluss erfolgten weitere Modellanpassungen und -erweiterungen:

- Aktualisierung von PHREEQC auf die Version 3.8.6.17100 (Parkhurst u. a. 2025),
- Konzentrierung auf die Wasserchemie im Bohrlochintervall Nr. 3, da seitens SCK CEN entschieden wurde, dass zunächst in diesem die Erhöhung des pH-Wert erfolgen soll,
- Ersatz der NaOH-Lauge als Reaktionsmittel durch ein synthetisches Zementporenwasser (Berner 1992; Altmaier u. a. 2024), das den Einfluss von degradiertem Zement in einem Endlager als Barrierenmaterial realitätsnäher widerspiegelt,
- Austausch der thermodynamischen Datenbasis gegen Cemdata18 (Lothenbach u. a. 2019), die sich auf Zementphasen spezialisiert und thermodynamische Basisdaten der ebenfalls auf Tonstein spezialisierten Datenbasis Thoenen u. a. (2014) enthält. In diesem Zusammenhang wird zur Bildung von Zementphasen ein ebenfalls realitätsnäherer Ansatz, ein sog. Solid-Solution-Ansatz (Lothenbach u. a. 2019) gewählt anstatt der Berechnung der Ausfällung von einzelnen Zementphasen.

Die aktualisierten Modellergebnisse inkl. detaillierter Modellbeschreibung und Einordnung der Ergebnisse in die wissenschaftliche Literatur wurden gemeinsam mit einzelnen Projektpartnern im Mont Terri BN-Konsortium in einem Special Issue zur Clay Conference zusammengefasst und publiziert (Weyand u. a. 2026).

8.3 Zusammenfassung und Ausblick

Mit Veröffentlichung des wissenschaftlichen Artikels Weyand u. a. (2026) ist die erste Unterstützung des Mont Terri BN-Experimentes seitens des BASE abgeschlossen. Es wurden anhand eines geochemischen Modells thermodynamische Berechnungen durchgeführt, um mögliche Ausfällungen und mineralogische Veränderungen bei erhöhtem pH-Wert im BN-Bohrloch des Felslabors Mont Terri abzuschätzen. Die Modellierungsergebnisse in Weyand u. a. (2026) zeigen, dass ein Anstieg des pH-Werts mittels Reaktion mit einem synthetischen Zementporenwasser zur Ausfällung von den Mineralen Calcit (Calciumkarbonat), Brucit (Magnesiumhydroxid) und mehreren Zementphasen führt.

Berücksichtigt man Kationenaustauschprozesse im Modell, so ist zur Erhöhung des pH-Werts aufgrund der Pufferwirkung des Opalinuston (Zhu u. a. 2023; Koroleva u. a. 2011) eine höhere Menge an Zementporenwasser erforderlich. Die Pufferwirkung entfaltet sich durch den Kationenaustausch von K^+ und Na^+ (erhöhte Konzentrationen im Zementporenwasser) mit hauptsächlich Mg_2^+ (aus den Tonmineralen, auch experimentell in Mäder u. a. (2018) am Zement-Opalinustonübergang nachgewiesen). Aufgrund der dann erhöhten Mg_2^+ -Konzentration in Lösung wird die Brucit-Ausfällung verstärkt und höhere Mengen können ausfallen. Die Modellierungsarbeit in Weyand u. a. (2026) zeigt, dass eine Erhöhung des pH-Werts bis ~10 zu einem nur geringen Risiko einer Verstopfung des In-situ-Experimentes führen würde, da sich Calcit nur in sehr geringen Mengen bildet und eine Brucit-Ausfällung vermieden wird. Oberhalb dieses pH-Werts könnten durch die Ausfällung von Brucit, insbesondere wenn diese punktuell erfolgt, Wasserleitungen mit kleinem Durchmesser oder auch die perforierten Gitter in den Bohrlöchern mit sehr kleinen Porendurchmessern (teilweise) verstopfen.

Es ist anzumerken, dass Ausfällungs- und Auflösungsprozesse in der Natur komplexer sind als in einem geochemischen/thermodynamischen Gleichgewichts_{SM}Modell abbildbar. Darüber hinaus werden bei höheren pH-Werten die Auflösungseffekte von Tonmineralen an der Grenzfläche zur umgebenden Tonformation relevanter. Daher ist zur weiteren Beurteilung dieser Frage zukünftig eine reaktive Stofftransportmodellierung angedacht, die das Strömungsregime innerhalb des In-situ Experiments abbildet und auch den zeitlichen Aspekt der pH-Wert Erhöhung berücksichtigen kann. Die Ergebnisse der Studie Weyand u. a. (2026) sollten aufgrund der geringen Volumina an Ausfällungen jedoch dazu ermutigen, den pH-Wert im BN-Experiment schrittweise zu erhöhen, um die Grenzen der mikrobiellen Aktivität zu untersuchen.

Darüber hinaus ist es im BASE-Forschungsprojekt „*Untersuchungen im übertägigen Labormaßstab zum Verhalten von Tongestein im Nahfeld des Einlagerungsbereiches radioaktiver Abfälle (UV-ToN)*“ (FKZ 4724F10401) angedacht, das In-Situ Experiment auf einer kleineren Skala in einem konventionellen Labor nachzubilden. Der pH-Wert soll in diesem Laborexperiment dann entsprechend den Randbedingungen in Weyand u. a. (2026) erhöht werden, um die Modellergebnisse zu validieren. Daraus resultierend soll dann in Folgearbeiten (z.B. im BASE-Forschungsprojekt „*Entwicklung und Verifizierung von Rechenprogrammen zur Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen 2 (ERLa2)*“ (FKZ 4726B10201)) Modellanpassungen erfolgen, die dann Eingang in die Durchführung des BN-Experimentes haben.

9 Indikatoren zu Einschluss und Isolation der wesentlichen Barrieren

Torben Weyand, Jens Eckel

In *Navarro u. a. (2019)* wurden Indikatoren zur Bewertung des Einschlusses und der Isolation von Radionukliden innerhalb der wesentlichen Barrieren (einschlusswirksamer Gebirgsbereich bzw. technische und geotechnische Barrieren gemäß § 23 Abs. 4 Standortauswahlgesetz (StandAG) (BGBl 2020)) eines Endlagersystems entwickelt. Es wurden neun Indikatoren vorgeschlagen, die sich auf unterschiedliche physikalische Bezugsgrößen beziehen, und in stoffmengen-, massen- und aktivitätsbezogene Indikatoren unterteilt werden. Die Funktions- und Wirkungsweise der Indikatoren wurde anhand von Transport- bzw. Ausbreitungsrechnungen für ein generisches Endlagersystem im Tongestein anhand vereinfachter Annahmen illustriert. Für die Anwendung der Indikatoren wurden die Berechnungen in einem diversifizierten Ansatz zur Qualitätssicherung der Ergebnisse mit zwei Rechenprogramme (MARNIE und TOUGH2-GRS) durchgeführt. Den Modellrechnungen lag das in Deutschland zu erwartende endzulagernde Inventar an hoch radioaktiven Abfällen auf Basis der Inventarbestimmung in der Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) in *Peiffer u. a. (2011)* sowie Parameterbandbreiten der geowissenschaftlichen Auswahlkriterien des StandAG zu Grunde. Die im StandAG genannten Bandbreiten an strömungs- und transportrelevanten Parametern wurden durch drei Rechenfälle abgebildet. Die vorgenannte Forschungsarbeit *Navarro u. a. (2019)* wurde in der Begründung zu § 4(5) EndlSiAnfV angeführt (Bundestag 2020).

Im Rahmen des Forschungsprojekts ERLa wurde das in der VSG prognostizierte Inventar an anfallenden hochradioaktiven Abfällen aus *Peiffer u. a. (2011)* anhand der inzwischen tatsächlich angefallenen Mengen aktualisiert. Zusätzlich wurden Kriterien entwickelt, die eine Auswahl der in Langzeitsicherheitsanalysen zu berücksichtigenden Radionuklide erlauben. Eine aus diesen Kriterien resultierende Auswahl ist dann begründet und nachvollziehbar. Der Ausrichtung zur zukünftigen Nutzung von Rechenprogrammen in Kap. 3 folgend, wurden die Zerfallsrechnungen für das in *Navarro u. a. (2019)* verwendete Inventar, bereinigt um Urantails, mit PFLOTRAN wiederholt und eine Vergleichbarkeit zu den Ergebnissen mit MARNIE hergestellt.

Diese Arbeiten werden im Forschungsprojekt ERLa2 in der Weise fortgeführt, dass die Ausbreitungsrechnungen für das generische Endlagersystem aus *Navarro u. a.*

(2019) mit PFLOTRAN wiederholt werden. Hierbei wird im Vordergrund stehen, die Sicherheitsreserven des Systems nach *Navarro (2025)* zu quantifizieren. Dazu werden Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalysen durchgeführt, die zu einem vertieften Verständnisses der Auswirkungen dieser Ungewissheiten und der Sicherheitsreserven des Systems beizutragen. Die Ergebnisse dieser Forschungsarbeiten können wie die Arbeiten aus *Navarro u. a. (2019)* bei einer möglichen Überprüfung und Weiterentwicklung von Regelwerken einfließen.

9.1 Bestimmung der Radionuklidmengen

9.1.1 Datengrundlage Inventar

An einem nach StandAG ermittelten Standort für ein Endlager in Deutschland für hochradioaktive Abfälle wird das endzulagernde Inventar an hoch radioaktiven Abfällen nach dem Nationalen Entsorgungsprogramm (NaPro) im Wesentlichen aus bestrahlten Brennelementen und Abfällen aus der Wiederaufarbeitung bestehen (*BMUV 2024a*). Für den Bestand an radioaktiven Abfällen wird im NaPro auf das Verzeichnis radioaktiver Abfälle in *BMUV (2024b)* verwiesen, das Angaben zu dem in Deutschland vorhandenen und zu erwartenden Mengeninventar macht (Stückzahl, Art der Abfallgebinde, Gesamtmassen). Nach *BMUV (2024b)* zählen zu den hochradioaktiven Abfällen entsprechend IAEA-Klassifikation die bestrahlten Brennelemente aus Leistungs- sowie Versuchs-, Demonstrations- und Forschungsreaktoren (VDF) und die Abfälle aus der Wiederaufarbeitung. Da der Betrieb des letzten Leistungsreaktors am 15. April 2023 endete, ist der Bestand nun bekannt (*BMUV 2024b*).

Da in *BMUV (2024b)* aber keine differenzierte Auflistung der Brennelemente (BE) aus Druckwasser-, Siedewasser- und Wasser-Wasser-Energie-Leistungsreaktoren (DWR, SWR, WWER) erfolgt, wird die Abfallprognose aus der VSG herangezogen. Im Rahmen dieser wurde das zu erwartende endzulagernde Inventar auf Basis des Ausstiegsbeschlusses aus der Kernenergienutzung in Deutschland (*AtG 2011*) zum damaligen Zeitpunkt prognostiziert (*Peiffer u. a. 2011*). Dieses wurde der aktuellen Prognose gegenübergestellt (Tab. 9-1). Die Anzahl an BE nach *Peiffer u. a. (2011)* differenziert zusätzlich die BE aus Leistungsreaktoren in die BE-Typen UO_2 -BE und Mischoxid-BE (MOX). Die Prognosen für die Abfälle aus der Wiederaufarbeitung sind in Tab. 9-2 erfasst.

Tab. 9-1: Stückzahl und Schwermetallmasse (in t_{SM}) der Brennelementen aus Leistungsreaktoren, Prognose nach *Peiffer u. a. (2011)* und Bestand zum 31. Dezember 2023 (*BMUV 2024b*).

	Stückzahl		Schwermetallmasse in t_{SM}	
	(<i>Peiffer u. a. 2011</i>)	(<i>BMUV 2024b</i>)	(<i>Peiffer u. a. 2011</i>)	(<i>BMUV 2024b</i>)
DWR-BE	15.600 ^a	-	7.180 ^b	-
SWR-BE	13.980 ^c	-	2.685 ^d	-
WWER-BE	5.050	-	590	-
Gesamt	34.620	34.451	10.445	10.036

^a Davon 1.250 MOX-BE, Rest UO_2 -BE

^b Davon 765 t_{SM} MOX-BE, Rest UO_2 -BE

^c Davon 1.530 MOX-BE, Rest UO_2 -BE

^d Davon 220 t_{SM} MOX-BE, Rest UO_2 -BE

Tab. 9-2: Abfallmengen aus der Wiederaufarbeitung bestrahlter Brennelemente (Anzahl Kokillen), Prognose aus *Peiffer u. a. (2011)* und (*BMUV 2024b*).

	(<i>Peiffer u. a. 2011</i>)	(<i>BMUV 2024b</i>)
CSD-V^a	3.785	3.836 ^b
CSD-B^c	308	-
CSD-C^d	4.104	-
Gesamt	8.192	3.836

^a Kokillen mit verglasten Spaltproduktlösungen und Feedklärschlämmen (*Peiffer u. a. 2011*).

^b inkl. 560 Kokillen aus dem Vereinigten Königreich (UK-HAW) und 140 Kokillen aus der Wiederaufarbeitung aus Karlsruhe (HAW-WAK), die nach (*Peiffer u. a. 2011*) den CSD-V insgesamt zugerechnet werden.

^c Kokillen mit verglasten Deko- und Spülwässern (*Peiffer u. a. 2011*).

^d Kokillen mit verpressten Hüllrohrstücken, Strukturteilen und Technologieabfällen (*Peiffer u. a. 2011*).

Aus den VDF-Reaktoren wird eine Abfallmenge im Bereich von 10 bis 12 t_{SM} erwartet (*BMUV 2024a*). Zu den VDF-Reaktoren gehören nach *Peiffer u. a. (2011)* die Forschungsneutronenquelle Garching des Heinz Maier-Leibnitz Instituts (auch Forschungsreaktor München II, kurz FRM II genannt), der Forschungsreaktor Mainz (FRMZ), der Berliner Experimentierreaktor II (BER II), der Versuchsreaktor der Arbeitsgemeinschaft Jülich (AVR), der Thorium-Hochtemperaturreaktor Hamm-Uentrop 300 (THTR), die kompakte natriumgekühlte Kernreaktoranlage Karlsruhe (KNK II) sowie das nuklear angetriebene Forschungsschiff Otto Hahn (NSOH). Aus den Prognosen von

Peiffer u. a. (2011) und dem Bestand nach BMUV (2024b) werden die öffentlich zur Verfügung stehenden Daten zu Anzahl an beladenen Behältern, Stückzahlen zu Brennelementen, Brennstäben bzw. Brennelement-Kugeln und deren Schwermetallmasse zusammengestellt (Tab. 9-3).

Tab. 9-3: Anzahl und Schwermetallmasse (in Tonnen Schwermetall t_{SM}) der Brennelemente bzw. Brennelementkugeln (BE-K) oder Brennstäbe (BS) aus VDF-Reaktoren, Prognose nach (Peiffer u. a. 2011) und Bestand zum 31. Dezember 2023 (BMUV 2024b).

	Anzahl Behälter		Stückzahl		Masse in t_{SM}
	(Peiffer u. a. 2011)	(BMUV 2024b)	(Peiffer u. a. 2011)	(BMUV 2024b)	(BMUV 2024b)
AVR	152	152	288.161 BE-K	288.334 BE-K ^a	2,001
THTR	305	305	617.606 BE-K	619.804 BE-K ^b	7,015
KNK+NSOH	4	4	2.536 BS ^c	2.539 ^d	0,5
BER II	20	-	ca. 120 BE	66 BE ^e	0,1016
FRM II	30	-	ca. 120 -150 BE	48 BE	0,3347
FRMZ	1	-	89 BE	83 BE	0,016

^a Inklusive 173 BE-Kugeln Äquivalente (1 kg_{SM}) als Kugelbruch im Reaktordruckbehälter (mit Leichtbeton vergossen).

^b Inklusive 2.198 BE-Kugeln Äquivalente als Kugelbruch (15 kg_{SM}) im sicheren Einschluss im Testreaktor (Spannbetonreaktorbehälter).

^c 2.484 Brennstäbe aus KNK II und 52 Brennstäbe aus NSOH.

^d 2.416 BS aus KNK II, 71 KNK-BS aus Nuklearexperimenten des Kernforschungszentrums Karlsruhe, 52 BS aus NSOH.

^e Auf Basis entsprechender Verträge wurden alle bis zum Jahr 2016 angefallenen bestrahlten Brennelemente in das Herkunftsland des Brennstoffes zurück transportiert (BMUV 2024a).

9.1.2 Methodik Berechnung Radionuklidaktivitäten

In BMUV (2024a) und BMUV (2024b) erfolgen keine Angaben zu radionuklidspezifischen Stoffmengen, Massen oder Aktivitäten. Daher wird zur Berechnung der radionuklidspezifischen Aktivitäten aus den Angaben zur Stückzahl bzw. Schwermetallmasse auf die Abbrandrechnungen und Aktivitätsbestimmungen der VSG zurückgegriffen (Peiffer u. a. 2011). Zur Berechnung der Stoffmenge¹³ werden die Halbwertszeiten¹⁴ der Nuclear Data Sheets *NNDS* (Dezember 2025) und zur Berech-

¹³Mit der Avogadro-Konstanten $N_A = 6.02214078 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ (Andreas u. a. 2011).

¹⁴Die Umrechnung der Zeiteinheiten erfolgte entsprechend der standard unit of time in physics (d.h. ein Jahr besteht aus 365,25 Tagen). Bestimmung der Zerfallskonstanten nach (Rutherford u. a. 1902).

nung der Massen die zugehörigen Molmassen des Evaluated Nuclear Structure Data File (ENSDF) verwendet.

9.1.2.1 Leistungsreaktoren

In *Peiffer u. a. (2011)* wurde die Anzahl der BE und deren Schwermetallmasse für DWR, SWR und WWER (jeweils für UO₂- und MOX-BE) für das Jahr 2035 prognostiziert (damals geplanter Beginn des Einlagerungsbetriebs am Standort Gorleben). Die BE wurden auf Basis der damals vorliegenden Informationen sog. Altersklassen mit einer zeitlichen Spannweite von jeweils fünf Jahren zugeordnet.

Der Beginn des Einlagerungsbetriebs für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle nach StandAG wird für den vorliegenden Bericht auf das Jahr 2080 abgeschätzt, resultierend aus der Annahme, dass der Standort im Jahr 2050 bestimmt ist (*BASE 2025; BGE 2025*) und für Genehmigung, Erkundung, Bau und Inbetriebnahme 30 Jahre, vgl. (*EndlKom 2016; Thomauske 2016; Thomauske u. a. 2016*), benötigt werden. Daher werden die BE im Vergleich zu *Peiffer u. a. (2011)* als 45 Jahre älter angenommen, d.h. die Zuordnung zu den Altersklassen verschiebt sich um neun Altersklassen. Die Spannweite der Altersklassen beträgt fünf Jahre, die Ergebnisse der Abbrandrechnungen und Aktivitätsbestimmungen nach *Peiffer u. a. (2011)* werden aber jahresscharf (im Abstand von fünf Jahren für BE aus Leistungsreaktoren) angegeben. Daher wird die spezifische Aktivität (in Bq/t_{SM}) der jeweils nächst passenden Jahresangabe verwendet (d.h. zur Bestimmung der Aktivität z.B. der BE aus der Altersklasse „56 – 60 Jahre“ wird die spezifische Aktivität zum Zeitpunkt „60 Jahre nach Entladung“ verwendet).

In der VSG wurde davon ausgegangen, dass für die BE aus Leistungsreaktoren 10.445 t_{SM} anfallen¹⁵, der tatsächliche Bestand nach *BMUV (2024b)* ist mit 10.036 t_{SM} leicht geringer¹⁶ (Tab. 9-1). Es wird angenommen, dass sich die in 2011 dokumentierte Prognose für 2035 auf die Altersklassen bis 24 Jahre nach Entladung bezogen hat, da der Bestand der älteren BE zum Veröffentlichungszeitpunkt in 2011 bekannt war. Daher wird zur Korrektur die Differenz von 409 t_{SM} gleichmäßig von den ersten drei Altersklassen der VSG („10 – 14 Jahre“, „15 – 19 Jahre“ und „20 – 24 Jahre“)

¹⁵Gilt für das Mengengerüst nach *Peiffer u. a. (2011)*, in *Larue u. a. (2013)* wurden abweichend 11.210 t_{SM} mit dem Argument angenommen, dass dies der Masse an frischem Kernbrennstoff entspricht, s. a. (*Seher 2013*).

¹⁶In *BMUV (2024a)* wird abweichend hiervon 10.038 t_{SM} angegeben, was mit der Rundungsprozedur auf ganze Zahlen bei Summenbildung begründet wird. Da *BMUV (2024a)* in einer Entwurfsfassung veröffentlicht wurde und die Literaturstelle zudem älter ist, werden für den vorliegenden Bericht die neueren Angaben nach *BMUV (2024b)* verwendet.

abgezogen (abgerundet 136 t_{SM} pro Altersklasse). Da keine Informationen vorliegen, ob in DWR oder SWR weniger BE als erwartet angefallen sind und auch nicht, ob weniger UO_2 - oder MOX-BE, werden die Schwermetallmassen entsprechend ihrer damals prognostizierten Anteile der jeweiligen Brennelementklassen subtrahiert, s. Tab. 9-4.

$$m_t = m_{t,VSG} - \frac{409t_{SM}}{3} \cdot \frac{m_{t,VSG}}{\sum m_{t,VSG}}, \quad (9.1)$$

wobei

m_t	Schwermetallmasse der Altersklasse für einen BE-Typ in t_{SM}
$m_{t,VSG}$	Schwermetallmasse der Altersklasse in der VSG für einen BE-Typ in t_{SM}
$\sum m_{t,VSG}$	Summe Schwermetallmassen aller BE-Typen der Altersklasse in der VSG in t_{SM}

Tab. 9-4: Schwermetallmassen (in Tonnen Schwermetall t_{SM}) der BE aus Leistungsreaktoren, nach Alter (in Jahren a) und BE-Typ differenziert, modifiziert nach (Peiffer u. a. 2011).

BE-Typ	60a	65a	70a	75a	80a	85a	90a
DWR- UO_2	529	725	1.027	1.680	1.300	800	60
DWR-MOX	25	53	78	360	210	20	-
SWR UO_2	113	261	339	950	610	75	30
SWR MOX	17	-	55	60	80	-	-
WWER DWR	-	-	-	-	-	-	580

Zur Bestimmung des radionuklidspezifischen Aktivitätsinventars werden die Schwermetallmassen (in t_{SM}) aus Tab. 9-4 mit den spezifischen Aktivitäten (in Bq/ t_{SM}) aus den Abbrandrechnungen von Peiffer u. a. (2011) für den jeweiligen BE-Typen multipliziert und anschließend summiert, um radionuklidspezifisch die Aktivität in Bq zu berechnen. Hierbei werden analog zu Larue u. a. (2013) die Aktivitäten der Hüllrohre vor der Multiplikation mit hinzuaddiert.

$$A_{RN} = m_{BE} \cdot (a_{RN,BE} + a_{RN,HR}) \quad (9.2)$$

mit

A_{RN}	Aktivität des Radionuklids in Bq
m_{BE}	Schwermetallmasse eines BE-Typs einer Altersklasse in t_{SM}
$a_{RN,BE}$	Spezifische Aktivität des Radionuklids eines BE-Typs einer Altersklasse in Bq/ t_{SM}
$a_{RN,HR}$	Spezifische Aktivität des Radionuklids des Hüllrohrs einer Altersklasse in Bq/ t_{SM}

Für die Hüllrohre wurden in Peiffer u. a. (2011) ausschließlich Aktivierungsrechnungen

für DWR-Brennstäbe durchgeführt, daher werden für SWR und WWER ebenfalls die Aktivierungsrechnungen für DWR-Brennstäbe verwendet. Dieses Vorgehen führt zu einer Überschätzung der real zu erwartenden Verhältnisse (Peiffer u. a. 2011).

Für WWER-BE werden in Peiffer u. a. (2011) spezifische Aktivitäten für WWER-KGR (Kernkraftwerk Greifswald) und WWER-KKR (Kernkraftwerk Rheinsberg) angegeben. Entsprechend der Annahmen nach Larue u. a. (2013) werden die spezifischen Aktivitäten für WWER-KGR für alle WWER-BE verwendet. Dieses Vorgehen führt zu einer Überschätzung der real zu erwartenden Verhältnisse.

Massendefekt

Nach Larue u. a. (2013) beziehen sich die Abbrandrechnungen für die Brennstoffmatrix und die Aktivierungsrechnungen für die Hüllrohre von Peiffer u. a. (2011) auf die Schwermetallmassen des frischen Brennstoffs und nicht auf diejenigen der abgebrannten Brennelemente (wie sie z.B. in BMUV (2024b) dokumentiert sind). Daher wird der sog. Massendefekt (Gamow 1930) anhand der jeweiligen Abbrände der BE-Typen berechnet (Tab. 9-5), um den Massenverlust durch die Energiefreisetzung nach Einstein (1905) zu ermitteln

$$m_E = \frac{E}{c^2} \cdot m_{BE} \quad (9.3)$$

mit

- m_E Massendefekt durch Energiefreisetzung in kg pro t_{SM}
- E Freigesetzte Energiemenge in GWd ($86.400 \cdot 10^9 \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2$)
- c Lichtgeschwindigkeit (299.792.458 m/s nach (Jennings u. a. 1987))
- m_{BE} Masse des BE-Typs in t_{SM}

Tab. 9-5: Berechneter Massendefekt pro BE-Typ mit Angaben zum Abbrand nach (Peiffer u. a. 2011).

BE-Typ	Abbrand in GWd/ t_{SM}	Masse in t_{SM} nach Tab. 9-1	Massende- fekt in kg/ t_{SM}	Massenver- lust in kg
DWR- UO_2 + MOX	55	6.867	0,053	363
SWR UO_2 + MOX	50	2.589	0,048	124
WWER DWR	30	580	0,029	17

Der Massenverlust für alle BE aus Leistungsreaktoren beträgt demnach ~504 kg. Da dieser kleiner ist als die Rundungsgenauigkeit, hier und in *Peiffer u. a. (2011)* sowie *Larue u. a. (2013)* von $1 t_{SM}$, wird der Massendefekt hier vernachlässigt.

9.1.2.2 Wiederaufarbeitung

Entsprechend dem Vorgehen für BE aus Leistungsreaktoren in Kap. 9.1.2.1 werden auch für die hochradioaktiven Abfälle aus der Wiederaufarbeitung (CSD-V nach *BMUV (2024b)*) die Stückzahlen pro Alter ermittelt (Tab. 9-6) auf Basis der Stückzahlen und Alterseingruppierungen nach (*Peiffer u. a. 2011*). Da die Prognose zur anfallenden Stückzahl an CSD-V aus *Peiffer u. a. (2011)* geringer ist als der Bestand nach *BMUV (2024b)*, wird die Differenz von 51 CSD-V¹⁷ (vgl. Tab. 9-2) der jüngsten Altersklasse (80 a) zugeschlagen.

Tab. 9-6: Stückzahlen an Kokillen aus der Wiederaufarbeitung, differenziert nach prognostiziertem Alter zum Jahr 2080.

	80 a	85 a	90 a	95 a
CSD-V	601	360	1.310	1.565

Die radiologische Charakterisierung erfolgt auf Basis der Aktivitätsbestimmungen nach (*Peiffer u. a. 2011*). Die Stückzahlen werden je Altersklasse nach Tab. 9-6 zur Ermittlung der Aktivität in Bq mit den spezifischen Aktivitäten in Bq/Kokille multipliziert.

9.1.2.3 VDF-Reaktoren

AVR

Im Forschungszentrum Jülich GmbH liegen die Daten zu den abgebrannten Brennelementen aus dem AVR vor (*Peiffer u. a. 2011*). Diese Daten wurden für *Peiffer u. a. (2011)* zu einem mittleren nuklidspezifischen Aktivitätsinventar pro CASTOR®-Behälter umgerechnet. Da zum hier prognostizierten Einlagerungsbeginn ab 2080 keine Daten vorliegen, wurde die spezifische Aktivität zum nächstliegenden Zeitpunkt mit vorliegenden Daten (Ende 2070) verwendet und mit der Anzahl an CASTOR®-Behältern nach *BMUV (2024b)* (Tab. Bestimmung der Radionuklidmengen-3) multipliziert. Der

¹⁷Für mehr Informationen s. z.B. *BGZ (2025)* und (*BASE 2025*).

Kugelbruch im Reaktordruckbehälter¹⁸ (1 kg_{SM}) wird aufgrund der geringen Masse hier vernachlässigt.

THTR

Für die Brennelemente des THTR 300 wurden zum Referenzdatum 31. Dezember 1993 für *Peiffer u. a. (2011)* eine Abbrandrechnung durchgeführt. Die spezifischen Aktivitäten pro CASTOR®-Behälter wurden bis maximal 50 Jahre nach Entladezeitpunkt berechnet. Da dies dem nächstmöglichen Zeitpunkt bis zum hier prognostizierten Einlagerungsbeginn 2080 entspricht, wurden diese Daten verwendet und mit der Anzahl an CASTOR®-Behältern aus *BMUV (2024b)* (Tab. 9-3) multipliziert. Der Kugelbruch im Spannsreaktorbehälter (15 kg_{SM}) wird aufgrund der geringen Masse hier vernachlässigt.

KNK II und NSOH

Zu jedem der vier CASTOR® Behälter wurden für *Peiffer u. a. (2011)* detaillierte Daten zum Aktivitätsinventar für das Bezugsdatum 2008 von den Energiewerken Nord GmbH (EWN) bereitgestellt (*WTI 2008*). Bis zum Jahr 2058 wurden mit dem Reststofffluss-Verfolgungs- und Dokumentationssystem *ISTEC (2003)* die Aktivität berechnet. Die Berechnung für das Jahr 2058 ist das zum hier prognostizierten Einlagerungsbeginn 2080 naheliegendste und wurde daher verwendet.

BER II

Informationen zu den Aktivitäten der Transurane und zur Gesamtaktivität von 52 bestrahlten Brennelementen liegen beim Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH vor (*Peiffer u. a. 2011*). Da es sich beim BER II um einen leichtwassermoderierten Reaktor handelt, wurden die nuklidspezifischen Aktivitäten über repräsentative OREST-Rechnungen für LWR in *Peiffer u. a. (2011)* abgeschätzt. Für das so ermittelte Nuklidspektrum wurde die zeitliche Entwicklung der nuklidspezifischen Aktivitäten pro Brennelement berechnet. Da der Betrieb des BER II zum 11. Dezember 2019 eingestellt wurde (*BMUV 2024b*), ist die Anzahl an BE bekannt (66 nach *BMUV (2024b)*) und wird anstatt der Prognose von 120 BE *Peiffer u. a. (2011)*

¹⁸Hierbei handelt es sich um Brennstoffkugeln, die durch eine ungleichmäßige Belastung im Reaktor zerbrochen sind bzw. nun festgesetzt sind, sodass diese noch nicht aus dem Reaktorbehälter herausgeholt wurden.

verwendet. Die nuklidspezifischen Aktivitäten werden nur bis max. 10 Jahre nach Entladung angegeben, da dies dem hier prognostizierten Einlagerungsbeginn 2080 am naheliegendsten ist¹⁹.

FRM II

Für den FRM II liegen nach *Peiffer u. a. (2011)* Daten über die nuklidspezifischen Aktivitäten eines bestrahlten Brennelements nach einem Einsatz von 60 Tagen unter Volllastbetrieb vor, aus denen dort die nuklidspezifischen Aktivitäten berechnet wurden. Da die Berechnungen pro BE ausschliesslich für 10 und 100 Jahre nach der Entladung vorliegen, werden die Werte für 10 Jahre nach Entladung verwendet, da der Zeitpunkt 100 Jahre nach Entladung das Aktivitätsinventar zum Einlagerungszeitpunkt leicht unterschätzen würde. Die aktuelle Stückzahl an BE sind nach *BMUV (2024b)* deutlich geringer als die Prognose von *Peiffer u. a. (2011)* (48 anstatt 120 – 150). Da der FRM II seit März 2020 stillsteht (*FRM 2020; FRM 2021*), ist nicht verlässlich vorherzusehen wie viele BE bis 2080 anfallen werden. Auch soll die Uran-Anreicherung der BE von derzeit 93% auf 20% U-235 reduziert werden (*FRM 2025*);, was einen Einfluss auf die Radionuklidzusammensetzung haben wird. Daher wird für den vorliegenden Bericht der Bestand nach *BMUV (2024b)* angenommen und die Anzahl an BE und deren radiologische Charakterisierung muss in zukünftigen Arbeiten ggfls. angepasst werden.

FRMZ

Aufgrund der fehlenden Angaben zur Aktivität, des kleinen Beitrags zum gesamten Mengengerüst (83 BE mit 16 kgSM im Kern nach *BMUV (2024b)* , 764 g Uran im Nasslager nach *BMUV (2024a)*) und der Erwartung²⁰ in *Peiffer u. a. (2011)* , dass diese Brennelemente von den USA zurückgenommen werden, werden die hochradioaktiven Abfälle aus dem FRMZ wie in *Peiffer u. a. (2011)* nicht berücksichtigt.

9.1.3 Auswahlkriterien Radionuklide

Zur Bewertung des sicheren Einschlusses der radioaktiven Abfälle innerhalb der wesentlichen Barrieren eines Endlagers kommen nach § 4 (5) EndlSiAnfV (*BMU 2020*) In-

¹⁹In *Peiffer u. a. (2011)* wird zwar die Gesamtaktivität der BE aus BER II nach 50 Jahren nach Entladung angegeben, im Anhang des Berichtes aber nuklidspezifisch nur bis 10 Jahre nach Entladung.

²⁰In *BMUV (2024a)* befindet sich hierzu keine aktualisierte Information.

dikatoren zur Anwendung, die sich auf die Masse bzw. Stoffmenge „aller ursprünglich eingelagerten Radionuklide“ als Referenzgröße beziehen. Daher ist es notwendig, die Menge an Radionukliden bei Einlagerung zu bestimmen bzw. zu prognostizieren. Da die im Folgenden beschriebenen Modellrechnungen nicht auf die Berechnung einer Dosisabschätzung abzielen, werden die Anforderungen der Berechnungsgrundlage für die Dosisabschätzung bei der Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen (BANZ 2022) hier nicht angewendet. Weiterhin werden im Folgenden nicht die Annahmen diskutiert, die den Abbrandrechnungen und Aktivitätsbestimmungen in Peiffer u. a. (2011) zu Grunde liegen²¹. Daher kann auch keine Einschätzung erfolgen, ob die dort ermittelten 303 Radionuklide alle Radionuklide sind, die eingelagert werden. Von einer Vollständigkeit wird im Folgenden ausgegangen.

Um für die Transportrechnungen eine numerisch handhabbare Anzahl an für die Langzeitsicherheit relevanten Radionukliden auszuwählen (z.B. wurden in Larue u. a. (2013) Transportrechnungen für 47 Radionuklide²² durchgeführt, s. auch Tab. A1), werden im Folgenden Überlegungen zu Kriterien aufgestellt, die zur Auswahl der Nuklide zur Bewertung des sicheren Einschlusses am Rand der wesentlichen Barrieren herangezogen werden könnten.

Stoffmengen- und Massenkriterium

Nach § 4 (5) EndLSiAnfV (BMU 2020) dürfen für zu erwartende Entwicklungen im Bewertungszeitraum jährlich höchstens ein Anteil von 10^{-9} sowohl der Masse als auch der Anzahl der Atome (Stoffmenge) aller ursprünglich eingelagerten Radionuklide aus dem Bereich der wesentlichen Barrieren ausgetragen werden

$$\frac{m_i}{\sum m_{RN}} > 10^{-9} \text{ bzw. } \frac{n_i}{\sum n_{RN}} > 10^{-9} \quad (9.4)$$

mit

$m_i; n_i$	Jährlich ausgetragene Masse bzw. Stoffmenge des Radionuklids in kg bzw. mol
$\sum m_{RN}; \sum n_{RN}$	Initial eingelagerte Masse bzw. Stoffmenge aller Radionuklide in kg bzw. mol

Wenn ein Radionuklid bei Einlagerung eine geringere Masse bzw. Stoffmenge besitzt,

²¹Hierzu gehört z.B., dass nach GRS (2023) teils größere Energiemengen pro BE gewonnen wurden (d.h. der Abbrand größer ist) als in der VSG angenommen, Änderungen in den Annahmen zu Verunreinigungen im Kernbrennstoff vorgenommen wurden sowie eine Diskussion zur Berücksichtigung des residualen Neutronenflusses.

²²In Tab. A.15 existiert bei einem Radionuklid ein Zahlendreher, Am-234 ist Am-243.

als der in Gl. 9.4 gezeigte Anteil (d.h. bei Freisetzung der gesamten Radionuklidmenge innerhalb eines Jahres würde nicht zur Verletzung des Kriteriums führen), wird es daher im Folgenden vernachlässigt. Die Masse der 303 Radionuklide beträgt insgesamt ~6,73 kt (die Stoffmenge ~28,7 Mmol), d.h. die Gesamtmasse eines bestimmten Radionuklids muss nach dem Kriterium größer sein als ~6,73 g (bzw. ~2,87 cmol).

Durch die Anwendung dieses Kriteriums würden lediglich 81 Radionuklide in der Auswahl verbleiben (84, wenn für die Stoffmenge angewandt, s. Tab. A1). Grenzfälle (eine Größenordnung kleiner als der obiger Grenzwert) sind Eu-155, Bi-208 und Np-236 (mit je ca. 6 g), Cs-134 mit ca. 4 g, La-137, Eu-152 und Np-239 (mit je ca. 3 g) und Sb-125 mit ca. 1 g. Unter Berücksichtigung der Stoffmenge wären es zusätzlich Cd-113m, Ba-137m, Tb-158, Lu-176, Re-186m und Th-228. Der Einfluss dieser 14 Radionuklide wird in einer Variationsrechnung betrachtet, insofern diese nicht durch andere Auswahlkriterien ausscheiden.

Halbwertszeitkriterium

Radionuklide mit sehr kleinen Halbwertszeiten werden noch während der Einlagerungszeit (von mehreren Jahrzehnten) bis zum Zeitpunkt des Verschlusses eines Endlagers, ab welchem frühestens ein Austrag in das umliegende Gestein postuliert werden kann, nahezu vollständig zerfallen sein. In (Larue u. a. 2013) wurden Radionuklide mit Halbwertszeiten kleiner als 20 Jahren vernachlässigt, die nicht Bestandteil der Thorium-, Neptunium-, Uran- oder der Actinium-Zerfallsreihe sind²³.

Unter der Annahme, dass zwischen Inbetriebnahme und vollständigem Verschluss eines Endlagers aufgerundet ca. 50 Jahre benötigt werden (vgl. Thomauske (2016) und Thomauske u. a. (2016)), werden Radionuklide mit einer Halbwertszeit von weniger als fünf Jahren (die Menge eines Radionuklids beträgt nach 10 Halbwertszeiten noch 0,1 %) weitestgehend zerfallen sein. Daher wird das folgende Kriterium zur Auswahl der Radionuklide verwendet.

$$T_{1/2} > 10 \cdot t \quad (9.5)$$

$T_{1/2}$ Halbwertszeit eines Radionuklids in Jahren
 t Betriebszeit des Endlagers in Jahren

Unter Anwendung dieses Kriteriums alleine verblieben 179 Radionuklide in der Aus-

²³Eine Ausnahme bilden drei Radionuklide, die eine Halbwertszeit nahe 20 Jahre haben (Pb-210, Pu-241, Cm-244). Die Stoffmengen dieser Radionuklide wurden jeweils ihren nächstberücksichtigten Mutternukliden (Ra-226, Am-241, Pu-244) zugeschlagen.

wahl (Tab. A1). Da die hier gewählte Halbwertszeit als Grenzwert bereits geringer ist als beispielsweise in *Larue u. a. (2013)*, erfolgt keine Betrachtung von Grenzfällen mit einer Halbwertszeit nur unwesentlich kleiner als fünf Jahre. Es wird für den vorliegenden Bericht nicht erneut untersucht, inwiefern Radionukliden mit kleineren Halbwertszeiten Teil einer Zerfallsreihe sind, sondern es wird sich im Folgenden auf die Annahmen in *Larue u. a. (2013)* berufen.

Zerfallskettenkriterium

Eine Ausnahme zum zuvor beschriebenen Halbwertszeitkriterium bilden Radionuklide mit kleineren Halbwertszeiten, die Bestandteil einer Zerfallsreihe sind. Hierbei werden die gleichen Annahmen wie in *Larue u. a. (2013)* zugrunde gelegt und die Thorium-, Neptunium-, Uran- und Actinium-Zerfallsreihe berücksichtigt (Abb. 9-1).

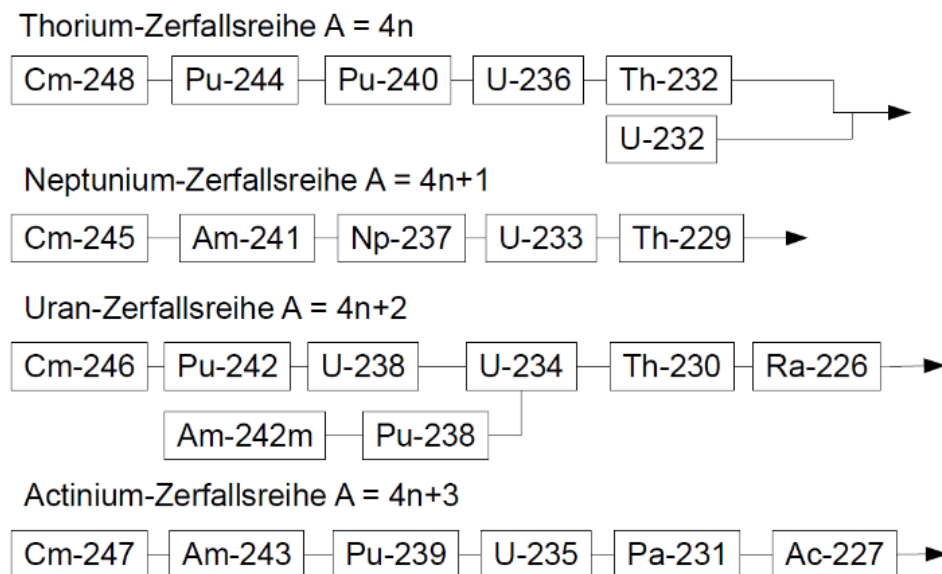


Abb. 9-1: Berücksichtigte Zerfallsreihen (*Larue u. a. 2013*).

Hierdurch werden insgesamt drei Radionuklide zusätzlich berücksichtigt, nämlich Ra-226 und Ac-227, die sonst durch das Stoffmengen- und Massenkriterium wegfallen würden, und Cm-247, dass das Aktivitätskriterium (s. unten) nicht erfüllen würde.

Aktivitätskriterium

In *AkEnd* (2002) wird argumentiert, dass langzeitrelevante Radionuklide diejenigen sind, die eine Aktivität von mehr als 10^{10} Bq besitzen, da kleinere Aktivitäten von 10^8 bis 10^9 Bq langlebiger Radionuklide (z.B. U-238, Np-237) jährlich uneingeschränkt freigegeben werden können. Daher ist denkbar, Radionuklide mit Aktivitäten

$$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq} \quad (9.6)$$

zu berücksichtigen. Insgesamt besitzen 43 Radionuklide initial eine kleinere Aktivität als 10^9 Bq (Tab. A1), die gleichzeitig aber eine Halbwertszeit größer als 5 Jahre haben.

Langlebige Radionuklide

Fünf der in *Peiffer u. a.* (2011) angegebenen Radionuklide (Te-123, Ce-142, Sm-149, Ta-180m, Pb-204) werden nach den Nuclear Data Sheets als stabil angenommen, vermutlich weil deren Halbwertszeit so groß wäre, dass das Isotop nicht mehr als Radionuklid angenommen werden kann. Die Stoffmengen bzw. Massen dieser fünf Isotope werden daher im Indikator nicht als „eingelagerte Radionuklide“ berücksichtigt. Es ist denkbar, dass auch andere Radionuklide, die innerhalb des Betrachtungszeitraums von einer Million Jahre nicht wesentlich zerfallen, vernachlässigt werden könnten. Der folgende Ansatz (zur Berücksichtigung eines Radionuklids muss die Halbwertszeit kleiner sein als das 100fache des Betrachtungszeitraums) wird für die vorliegenden Modellrechnungen allerdings nur in einer Variationsrechnung verfolgt, um langlebige Spalt- und Aktivierungsprodukte nicht auszuschließen, die in *Larue u. a.* (2013) berücksichtigt wurden:

$$T_{1/2} < 100 \cdot t \quad (9.7)$$

Betroffen wären im Beispiel insgesamt 25 Radionuklide (Tab. A1).

Die vorgeschlagenen Kriterien zur Auswahl von Radionukliden sind in der Tab. 9-7 zusammengefasst

9.1.4 Ergebnis Radionuklidmengen

Für den Basisrechenfall werden diejenigen Radionuklide ausgewählt, welche die vier Kriterien zu Stoffmenge, Masse, Aktivität und Halbwertszeit erfüllen zzgl. der-

Tab. 9-7: Vorgeschlagene Kriterien zur Auswahl von Radionukliden für Transportrechnungen in Langzeitsicherheitsanalysen.

Stoffmengen- und Massenkriterium	$\frac{n_i}{\sum n_{RN}} > 10^{-9}$ bzw. $\frac{m_i}{\sum m_{RN}} > 10^{-9}$
Halbwertszeitkriterium	$T_{1/2} > 10 \cdot t$
Zerfallskettenkriterium	Thorium-, Neptunium-, Uran- und Actinium-Zerfallsreihe
Aktivitätskriterium	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$
Langlebige Radionuklide	$T_{1/2} < 100 \cdot t$

jenigen, die Teil der zuvor genannten vier Zerfallsreihen sind. Somit verbleiben 58 Radionuklide in der Auswahl, siehe Tab. 9-8. Diese 58 Radionuklide besitzen eine Stoffmenge von ~28,3 Mmol und eine Masse von ~6,73 kt. Würden alle 303 Radionuklide berücksichtigt, wären es ~28,7 Mmol mit ~6,68 kt, also annähernd ähnliche Mengen bei deutlicher Reduktion der Radionuklide.

In *Larue u. a. (2013)* wurden 47 Radionuklide berücksichtigt. Hinzugekommen sind insb. Radionuklide mit geringen Halbwertszeiten (kleiner 20 Jahre), aber auch Ar-39 (268 a), Tc-98 (4,2*10⁶ a), Eu-154 (86 a) und Cm-243 (29 a). Andersherum werden im vorliegenden Bericht alle Radionuklide berücksichtigt, die auch in *Larue u. a. (2013)* berücksichtigt wurden.

Tab. 9-8: Aktivitäten, Stoffmengen und Massen der berücksichtigten Radionuklide (RN) für BE aus Leistungsreaktoren (LR), den Kokillen aus der Wiederaufarbeitung (CSD-V), sowie hochradioaktive Abfälle aus VDF-Reaktoren.

RN	$A_{\text{BE-LR}}$ in Bq	$A_{\text{CSD-V}}$ in Bq	A_{VDF} in Bq	$\sum A_{\text{RN}}$ in Bq	$\sum n_{\text{RN}}$ in mol	$\sum m_{\text{RN}}$ in kg
H-3	5,24E+15	9,61E+14	4,11E+13	6,24E+15	5,81E+00	1,75E-02
Be-10	8,54E+10	4,37E+10	2,11E+09	1,31E+11	1,38E+01	1,38E-01
C-14	2,88E+14	7,21E+13	4,62E+12	3,65E+14	1,57E+02	2,20E+00
Cl-36	8,80E+12	2,04E+12	1,34E+11	1,10E+13	2,50E+02	9,00E+00
Ar-39	4,09E+13	2,39E+13	9,11E+07	6,48E+13	1,31E+00	5,11E-02
Ca-41	4,58E+11	1,54E+11	4,49E+08	6,12E+11	4,60E+00	1,88E-01
Co-60	4,05E+14	7,54E+11	5,02E+10	4,06E+14	1,62E-01	9,68E-03
Ni-59	2,02E+15	3,48E+11	5,65E+09	2,02E+15	1,23E+04	7,28E+02
Ni-63	1,72E+17	2,74E+13	1,46E+11	1,72E+17	1,31E+03	8,23E+01

Tab. 9-8: Aktivitäten, Stoffmengen und Massen der berücksichtigten Radionuklide (RN) für BE aus Leistungsreaktoren (LR), den Kokillen aus der Wiederaufarbeitung (CSD-V), sowie hochradioaktive Abfälle aus VDF-Reaktoren. (Fortsetzung)

RN	$A_{\text{BE-LR}}$ in Bq	$A_{\text{CSD-V}}$ in Bq	A_{VDF} in Bq	$\sum A_{\text{RN}}$ in Bq	$\sum n_{\text{RN}}$ in mol	$\sum m_{\text{RN}}$ in kg
Se-79	1,69E+13	9,29E+12	2,27E+11	2,64E+13	6,59E+02	5,20E+01
Kr-85	2,95E+16	3,16E+01	7,59E+14	3,02E+16	2,45E+01	2,08E+00
Rb-87	7,51E+09	4,44E+09	2,10E+07	1,20E+10	4,50E+04	3,91E+03
Sr-90	4,22E+18	1,63E+18	2,25E+16	5,87E+18	1,28E+04	1,15E+03
Zr-93	7,06E+14	3,72E+14	1,78E+12	1,08E+15	1,31E+05	1,22E+04
Nb-93m	7,23E+14	3,65E+14	1,56E+12	1,09E+15	1,33E+00	1,23E-01
Nb-94	3,18E+15	6,21E+10	2,12E+10	3,18E+15	4,90E+03	4,60E+02
Mo-93	4,36E+13	1,92E+11	1,76E+09	4,38E+13	1,33E+01	1,23E+00
Tc-98	6,21E+09	2,01E+09	2,22E+05	8,23E+09	2,61E+00	2,56E-01
Tc-99	5,23E+15	2,87E+15	1,08E+13	8,11E+15	1,29E+05	1,28E+04
Pd-107	5,61E+13	2,15E+13	1,28E+10	7,75E+13	3,81E+04	4,07E+03
Ag-108m	2,23E+13	1,22E+13	2,05E+10	3,45E+13	1,14E+00	1,23E-01
Sn-121m	2,42E+15	8,28E+14	9,71E+11	3,25E+15	1,08E+01	1,30E+00
Sn-126	2,28E+14	1,04E+14	3,33E+11	3,33E+14	4,98E+03	6,28E+02
I-129	1,13E+13	5,41E+12	2,04E+10	1,67E+13	2,04E+04	2,62E+03
Cs-135	1,91E+14	8,94E+13	2,82E+11	2,81E+14	2,82E+04	3,81E+03
Cs-137	7,47E+18	2,55E+18	2,42E+16	1,01E+19	2,28E+04	3,12E+03
Sm-147	1,83E+09	1,21E+09	2,93E+06	3,05E+09	2,46E+04	3,61E+03
Sm-151	7,87E+16	3,45E+16	1,80E+14	1,13E+17	8,10E+02	1,22E+02
Eu-154	8,10E+15	6,42E+14	1,18E+14	8,86E+15	5,75E+00	8,86E-01
Ho-166m	5,04E+11	8,85E+10	2,44E+09	5,95E+11	5,09E-02	8,45E-03
Ra-226	4,20E+09	6,58E+08	2,78E+08	5,13E+09	6,21E-04	1,40E-04
Ac-227	1,67E+10	7,78E+09	7,01E+10	9,47E+10	1,56E-04	3,54E-05
Th-229	4,47E+09	3,23E+08	3,08E+11	3,13E+11	1,87E-01	4,28E-02
Th-230	2,89E+11	1,71E+10	1,43E+10	3,21E+11	1,83E+00	4,20E-01
Th-232	1,44E+08	1,19E+08	3,08E+10	3,11E+10	3,30E+04	7,67E+03
Pa-231	2,02E+10	8,20E+09	8,62E+10	1,15E+11	2,84E-01	6,55E-02
U-232	1,03E+13	7,92E+09	3,57E+13	4,61E+13	2,40E-01	5,57E-02

Tab. 9-8: Aktivitäten, Stoffmengen und Massen der berücksichtigten Radionuklide (RN) für BE aus Leistungsreaktoren (LR), den Kokillen aus der Wiederaufarbeitung (CSD-V), sowie hochradioaktive Abfälle aus VDF-Reaktoren. (Fortsetzung)

RN	$A_{\text{BE-LR}}$ in Bq	$A_{\text{CSD-V}}$ in Bq	A_{VDF} in Bq	$\sum A_{\text{RN}}$ in Bq	$\sum n_{\text{RN}}$ in mol	$\sum m_{\text{RN}}$ in kg
U-233	6,95E+11	2,66E+10	5,68E+13	5,76E+13	6,93E+02	1,61E+02
U-234	5,83E+14	1,07E+12	4,85E+12	5,89E+14	1,09E+04	2,56E+03
U-235	3,09E+12	6,70E+09	3,42E+10	3,13E+12	1,67E+05	3,92E+04
U-236	7,50E+13	8,46E+10	2,46E+11	7,53E+13	1,33E+05	3,15E+04
U-238	7,97E+13	9,91E+10	1,15E+10	7,98E+13	2,69E+07	6,41E+06
Np-237	1,59E+14	6,91E+13	1,67E+11	2,28E+14	3,70E+04	8,77E+03
Pu-238	1,57E+18	2,05E+15	7,30E+14	1,57E+18	1,04E+04	2,48E+03
Pu-239	1,24E+17	4,47E+14	1,10E+14	1,25E+17	2,27E+05	5,43E+04
Pu-240	2,92E+17	1,33E+15	1,50E+14	2,94E+17	1,46E+05	3,50E+04
Pu-241	6,69E+18	2,00E+15	1,68E+15	6,69E+18	7,25E+03	1,75E+03
Pu-242	1,82E+15	2,33E+12	2,09E+11	1,82E+15	5,17E+04	1,25E+04
Pu-244	7,74E+08	3,74E+05	1,44E+04	7,74E+08	4,76E+00	1,16E+00
Am-241	2,26E+18	1,65E+17	7,09E+14	2,43E+18	7,94E+04	1,91E+04
Am-242m	9,20E+15	8,64E+14	2,54E+11	1,01E+16	1,08E+02	2,61E+01
Am-243	2,32E+16	3,01E+15	1,05E+12	2,62E+16	1,46E+04	3,54E+03
Cm-243	7,29E+15	2,76E+14	3,12E+11	7,56E+15	1,67E+01	4,06E+00
Cm-244	7,75E+17	8,95E+15	5,38E+13	7,84E+17	1,07E+03	2,62E+02
Cm-245	1,02E+15	2,62E+13	8,96E+09	1,05E+15	6,54E+02	1,60E+02
Cm-246	1,74E+14	3,71E+12	2,41E+09	1,78E+14	6,39E+01	1,57E+01
Cm-247	9,63E+08	9,67E+06	8,65E+03	9,73E+08	1,15E+00	2,84E-01
Cm-248	2,47E+09	1,85E+07	2,69E+04	2,49E+09	6,54E-02	1,62E-02

9.2 Vergleich des Inventars zwischen MARNIE und PFLOTTRAN

Der Ausrichtung zur zukünftigen Nutzung von Rechenprogrammen in Kap. 3 folgend, wurden die Zerfallsrechnungen für das in Navarro u. a. (2019) verwendete Inventar, bereinigt um Strukturteile und Urantails, mit PFLOTTRAN wiederholt und eine Vergleichbarkeit zu den Ergebnissen mit MARNIE hergestellt. Der Datensatz in PFLO-

TRAN besteht aus einer einzelnen Box ohne Fluß- und Transportbedingungen, in der das gesamte Inventar zum Startzeitpunkt freigesetzt wird. Das Inventar wird über das Prozessmodul WASTEFORM vorgegeben und der Zerfall der Nuklide wird über das Prozessmodul UFD_DECAY berechnet. Beide Module sind an das Modul GENERAL gekoppelt, über das dann auch Fluss und Transport der gelösten Radionuklide in den geplanten Ausbreitungsrechnungen stattfinden wird. Der Aktivitätsverlauf als Ergebnis von Pflotran ist in der Abb. A1 gezeigt.

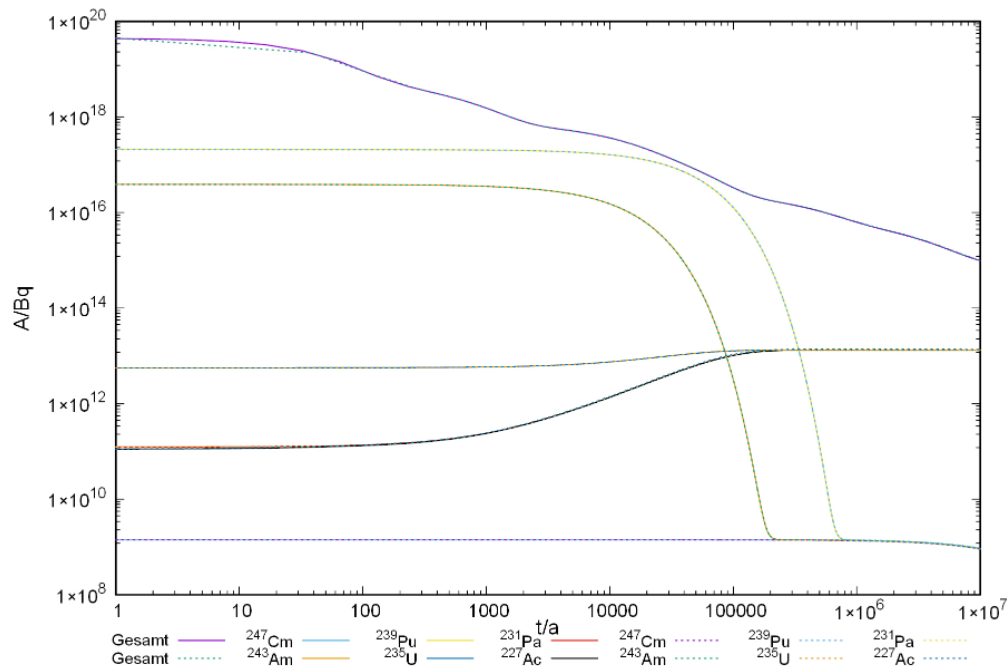


Abb. 9-2: Vergleich des zeitlichen Verlaufes des Gesamtinventars, sowie der Actinium Reihe. Die durchgezogenen Linien zeigen die Ergebnisse von PFLOTTRAN, die gestrichelten die von MARNIE.

Um die Ergebnisse von PFLOTTRAN und MARNIE vergleichen zu können, ist in der Abb. 9-2 der zeitliche Verlauf der Aktivität des Gesamtinventars zusammen mit dem zeitlichen Verlauf der Mitglieder der Actiniumkette, siehe Abb. 9-1, gezeigt. Die Übereinstimmung ist über den gesamten Zeitraum bis zu 10^7 Jahren sehr gut. Dies zeigt sich auch in den Abb. A2 bis A7, wo der zeitliche Verlauf für die einzelnen Nuklide zwischen PFLOTTRAN und MARNIE gegenübergestellt ist.

Literatur

AkEnd (2002)

AkEnd: Auswahlverfahren für Endlagerstandorte: Empfehlungen des AkEnd: Abschlussbericht. Köln: Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte, 2002.

Alt-Epping u. a. (2015)

Alt-Epping, P., Tournassat, C., Rasouli, P., Steefel, C., Mayer, K., Jenni, A., Mäder, U., Sengor, S. & Fernández, R.: Benchmark reactive transport simulations of a column experiment in compacted bentonite with multispecies diffusion and explicit treatment of electrostatic effects. *Computational Geosciences* 19.3 (2015), S. 535–550.

Altmaier u. a. (2024)

Altmaier, M., Ricard, D., Vandenborre, J., García, D., Henocq, P., Macé, N. & Missana, T.: Final report on results generated in CORI. Final version of deliverables D3.6, D3.7 and D.8 of the HORI-ZON 2020 project EURAD: EC Grant agreement no: 847593. 5. Juli 2024.

Andreas u. a. (2011)

Andreas, B. u. a.: Determination of the Avogadro constant by counting the atoms in a ²⁸Si crystal. *Physical Review Letters (Phys. Rev. Lett.)* 106.3 (2011), S. 030801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.030801.

Appelo u. a. (2010)

Appelo, C. A. J., Van Loon, L. & Wersin, P.: Multicomponent diffusion of a suite of tracers (HTO, Cl, Br, I, Na, Sr, Cs) in a single sample of Opalinus Clay. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 74.4 (2010), S. 1201–1219.

Appelo u. a. (2007)

Appelo, C. A. J. & Wersin, P.: Multicomponent diffusion modeling in clay systems with application to the diffusion of tritium, iodide, and sodium in opalinus clay. *Environmental science & technology* 41.14 (2007), S. 5002–5007.

AtG (2011)

AtG: Gesetz über die friedliche Verwendung der Kernenergie und den Schutz gegen ihre Gefahren: Atomgesetz - AtG. Bd. 43. BGBl. I. 5. August 2011.

Avila u. a. (2015)

Avila, L. & U. Ayachit, Hrsg.: The ParaView guide: Updated for ParaView version 4.3. Full color version. Clifton Park, NY: Kitware Inc, 2015. ISBN: 9781930934306.

Avila, L. S. u. a. (2010)

Avila, L. S. u. a.: The VTK User's Guide. Kitware, Inc., 2010.

Ayachit (2019)

Ayachit, U.: The ParaView Guide: Updated for ParaView version 5.6. Los Alamos National Labs (LANL): Kitware, 21. Januar 2019.

BAnz (2022)

BAnz: Berechnungsgrundlage für die Dosisabschätzung bei der Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen. BAnz AT 30.12.2022 B15. Berlin: Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung, Dezember 2022.

BASE (2025)

BASE: Beschleunigungspotenziale im Standortauswahlverfahren. Berlin: Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung, März 2025.

Bear (2018)

Bear, J.: Modeling Phenomena of Flow and Transport in Porous Media. Bd. 31. Theory and Applications of Transport in Porous Media. Cham: Springer International Publishing, 2018. ISBN: 978-3-319-72825-4. DOI: 10.1007/978-3-319-72826-1.

Becker u. a. (1997)

Becker, A., Fischer, H., Hofer, E., Kloos, M., Krzykacz, B., Martens, K.-H. & Röhlig, K.-J.: Evaluation of elements responsible for the effective engaged dose rates associated with the final Storage of radioactive waste (EVEREST project): Volume 3a: Salt formation, site in Germany. Bd. EUR 17449/3a EN. Nuclear Science and Technology. Luxembourg: EUR-OP, 1997. ISBN: 92-828-0531-x.

Beisbart u. a. (2019)

Beisbart, C. & N. J. Saam, Hrsg.: Computer simulation validation: Fundamental concepts, methodological frameworks, and philosophical

perspectives. Simulation foundations, methods and applications. Cham: Springer, 2019. ISBN: 9783319707655. DOI: Claus.

Berner (1992)

Berner, U. R.: Evolution of pore water chemistry during degradation of cement in a radioactive waste repository environment. *Waste Management* 12.2-3 (1992), S. 201–219. ISSN: 0956-053X. DOI: 10.1016/0956-053X(92)90049-O.

BfE (2019)

BfE: BfE startet Partnerschaft mit Felslabor Mont Terri. Berlin, Mai 2019.

BGBI (2020)

BGBI: Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle: StandAG. 19. Juni 2020.

BGE (2025)

BGE: Diskussionsvorschlag zur zeitlichen Optimierung des Standortauswahlverfahrens: Vom Standortregionenvorschlag bis zur Standortfestlegung. Peine: Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH, 30. Januar 2025.

BGE (2022)

BGE: Zeitliche Betrachtung des Standortauswahlverfahrens. Hrsg. von Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH. Peine, 2022.

BGZ (2025)

BGZ: Rücknahme radioaktiver Abfälle aus der Wiederaufarbeitung. 2025.

Birkholzer u. a. (2019)

Birkholzer, J. T., Tsang, C.-F., Bond, A. E., Hudson, J. A., Jing, L. & Stephansson, O.: 25 years of DECOVALEX - Scientific advances and lessons learned from an international research collaboration in coupled subsurface processes. *en. Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* (1997) 122.103995 (Oktober 2019), S. 103995.

Bleyen u. a. (2019)

Bleyen, N., Albrecht, A., De Cannière, P., Wittebroodt, C. & Valcke, E.: Non-destructive on-line and long-term monitoring of in situ nitrate and nitrite reactivity in a clay environment at increasing turbidity. *en. Appl. Geochem.* 100 (Januar 2019), S. 131–142.

Bleyen u. a. (2021)

Bleyen, N., Small, J. S., Mijnenonckx, K., Hen-

drix, K., Albrecht, A., De Cannière, P., Surkova, M., Wittebroodt, C. & Valcke, E.: Ex and In Situ Reactivity and Sorption of Selenium in Opalinus Clay in the Presence of a Selenium Reducing Microbial Community. *Minerals* 11.7 (2021), S. 757. DOI: 10.3390/min11070757.

Bleyen u. a. (2017)

Bleyen, N., Smets, S., Small, J., Moors, H., Leys, N., Albrecht, A., De Cannière, P., Schwyn, B., Wittebroodt, C. & Valcke, E.: Impact of the electron donor on in situ microbial nitrate reduction in Opalinus Clay: results from the Mont Terri rock laboratory (Switzerland). *Swiss J. Geosci.* 110.1 (Februar 2017), S. 355–374.

BMU (2020)

BMU: Verordnung über Sicherheitsanforderungen und vorläufige Sicherheitsuntersuchungen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle: Veröffentlichter Verordnungsentwurf. Bonn: Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit, 6. April 2020.

BMUV (2024a)

BMUV: Programm für eine verantwortungsvolle und sichere Entsorgung bestrahlter Brennelemente und radioaktiver Abfälle (Nationales Entsorgungsprogramm): Entwurf. Bonn: Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz, 5. Juli 2024.

BMUV (2024b)

BMUV: Verzeichnis radioaktiver Abfälle (Bestand zum 31. Dezember 2023 und Prognose). Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz, Dezember 2024.

Bogorinski u. a. (1996)

Bogorinski, P., Pörtl B. & Röhlig, K.-J.: Entwicklung und Umsetzung von Qualifizierungsstrategien für Rechenodes zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern: Abschlußbericht. GRS-A-2272. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH, Juli 1996.

Bundestag (2020)

Bundestag, D.: Verordnung des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit: Verordnung über Sicherheitsanforderungen und vorläufige Sicherheitsuntersuchun-

gen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle. Berlin, 18. Mai 2020.

CEA (2019)

CEA: SALOME. online. 2019.

CGNS (2025)

CGNS: CGNS Overview. 2025.

Dash u. a. (2015)

Dash, Z. V., Robinson, B. A., Pawar, R. J. & Chu, S.: Software Validation Report for the FEHM Application. LA-UR-15-27776. Los Alamos National Laboratory, 14. Dezember 2015.

De Cannière u. a. (2010)

De Cannière, P., Maes, A., Williams, S., Brugge-man, C., Beauwens, T., Maes, N. & Cowper, M.: Behaviour of Selenium in Boom Clay. SCK-CEN-ER-120. Mol: Belgian Nuclear Research Center, Mai 2010.

DIN (2015a)

DIN: Qualitätsmanagementsysteme - Anforderungen. Berlin, 1. November 2015.

DIN (2015b)

DIN: Qualitätsmanagementsysteme - Grundlagen und Begriffe. Berlin, 1. November 2015.

Eckel (2024)

Eckel, J.: Add anisotropic tortuosity for transport. 3. Januar 2024.

EDF (2019)

EDF: 3.1. [U1.03.00]: Main principles of Code_Aster: 3.1.2.3. MED mesh file. 2019.

EDF (2026)

EDF: Notes on the MED file format. Hrsg. von Électricité de France. 2026.

Einstein (1905)

Einstein, A.: Ist die Trägheit eines Körpers von seinem Energieinhalt abhängig? Annalen der Physik 323.13 (1905), S. 639–643. ISSN: 1521-3889.

EndlKom (2016)

EndlKom: Abschlussbericht: Verantwortung für die Zukunft - Ein faires und transparentes Verfahren für die Auswahl eines nationalen Endlagerstandortes. K-Drs. 268. Berlin: Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe, 30. August 2016.

ENSI (2022)

ENSI: Aufsicht über geologische Tiefenlager. ENSI-AN-10062.

EPS (2016)

EPS: Report on the European Pilot Study on the Regulatory Review of a Safety Case for Geological Disposal of Radioactive Waste. European Pilot Study, August 2016.

Feder u. a. (2022)

Feder, J., Flekkøy, E. G. & Hansen, A.: Physics of flow in porous media. Cambridge, England: Cambridge University Press, Oktober 2022.

Frieling u. a. (2016)

Frieling, G. & Kock, I.: Modellkonzepte, Prozesse und Rechenfälle für das Vorhaben ZIESEL. Synthesebericht Teil 2/2: Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager am Beispiel des ERAM. Bd. GRS-397. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2016. ISBN: 978-3-944161-78-5.

Frieling u. a. (2018)

Frieling, G., Navarro, M., Seher, H. & Weyand, T.: "Modellierung dichteabhängiger Transportprozesse im Fernfeld eines Endlagers". Entwicklung von Methoden zum Nachweis der Betriebs- und Langzeitsicherheit von Endlagern. Hrsg. von M. Navarro, J. Eckel, H. Fischer, G. Frieling, S. Hotzel, I. Kock, A. Krischer, H. Seher, S. Uhlmann & T. Weyand. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, September 2018, S. 77–144. ISBN: 978-3-946607-99-1.

FRM (2025)

FRM: Der Weg zur Umrüstung. 2025.

FRM (2021)

FRM: Meldepflichtiges Ereignis neu eingestuft. 13. Januar 2021.

FRM (2020)

FRM: Reaktorzyklus wegen Reisebeschränkungen verschoben. 16. März 2020.

Gamow (1930)

Gamow, G.: Mass defect curve and nuclear constitution. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences (Proc. A) 126.803 (1930), S. 632–644. DOI: 10.1098/rspa.1930.0032.

Genuchten (1985)

Genuchten, M. T. van: Convective-dispersive transport of solutes involved in sequential first-order decay reactions. *Computers and Geosciences* 11.2 (1985), S. 129–147. ISSN: 0098-3004. DOI: 10.1016/0098-3004(85)90003-2.

Geuzaine u. a. (2025a)

Geuzaine, C. & Remacle, J.-F.: Chapter 10: Gmsh file formats. 2025.

Geuzaine u. a. (2009)

Geuzaine, C. & Remacle, J.-F.: Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79.11 (2009), S. 1309–1331. ISSN: 0029-5981. DOI: 10.1002/nme.2579.

Geuzaine u. a. (2025b)

Geuzaine, C. & Remacle, J.-F.: Gmsh: A three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. 2025.

Grambow (2008)

Grambow, B.: Mobile fission and activation products in nuclear waste disposal. *Journal of Contaminant Hydrology* 102.3-4 (2008), S. 180–186. ISSN: 0169-7722. DOI: 10.1016/j.jconhyd.2008.10.006.

GRS (2023)

GRS: Rechnungen zum Nuklidinventar für die Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (rvSU) im Rahmen des Standortauswahlverfahrens. GRS-A-4099. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH, Februar 2023.

Haar u. a. (1984)

Haar, L., Gallagher, J. S., Kell, G. S. & (U.S.), N. S. R. D. S.: NBS/NRC steam tables : thermodynamic and transport properties and computer programs for vapor and liquid states of water in SI units / Lester Haar, John S. Gallagher, George S. Kell. eng. Washington, [D.C.: Hemisphere Pub. Corp., 1984. ISBN: 0891163549.

HDF Group (2015)

HDF Group: HDF5_Users_Guide: HDF5 Release 1.11.x. Champaign, Illinois 61820, 2015.

HDF Group (2026)

HDF Group: The HDF5 Field Guide: Introduction to HDF5. 4. Februar 2026.

Hendrix u. a. (2022)

Hendrix, K., Mijndendonckx, K., Bleyen, N., Moors, H., Leys, N. & Valcke, E.: BN Experiment: Chemical and microbial analysis of phase 27. TN 2022-22. Belgium: Belgian Nuclear Research Center, Oktober 2022.

Hotzel u. a. (in prep.)

Hotzel, S., Rücker, C. & Eckel, J.: Weiterentwicklung von Rechenprogrammen zu thermo-hydro-mechanisch gekoppelten (THM) Prozessen in Endlagersystemen durch Teilnahme am Benchmark BenVaSim-II. in prep.

IAEA (2011)

IAEA: Disposal of Radioactive Waste. Specific Safety Requirements. Vienna: IAEA, 2011.

IAEA (2017)

IAEA: GEOSAF Project: International Project on Demonstrating the Safety of Geological Disposal. 2017.

IAEA (2026)

IAEA: The International Project on Demonstration of Safety for Geological Disposal (GEOSAF PROJECT). International Atomic Energy Agency, 2026. ISBN: 9789201018267. DOI: 10.61092/iaea.3dqv-11fo.

ISO (2018)

ISO: Software engineering – Guidelines for the application of ISO 9001:2015 to computer software. 1. November 2018.

ISTEC (2003)

ISTEC: Erfassung und Verfolgung radioaktiver Reststoffe und Abfälle. Köln: Institut für Sicherheitstechnologie GmbH, 2003.

Itasca (2013)

Itasca: FLAC3D – Fast Lagrangian Analysis of Continua in Three-Dimensions, Ver. 9.0. Itasca Consulting Group, Inc., 2013.

Jendras u. a. (2022)

Jendras, M. & Weyand, T.: New partner BASE: Introduction and future contribution to BN in phase 28 and beyond. 28. Januar 2022.

Jennings u. a. (1987)

Jennings, D. A., Drullinger, R. E., Evenson, K. M.,

Pollock, C. R. & Wells, J. S.: The continuity of the meter - the redefinition of the meter and the speed of visible-light. *Journal of Research of the National Bureau of Standards* 92.1 (1987), S. 11. ISSN: 0160-1741. DOI: 10.6028/jres.092.001.

Jung u. a. (2017)

Jung, Y., Pau, G. S. H., Finsterle, S. & Pollyea, R. M.: TOUGH3: A new efficient version of the TOUGH suite of multiphase flow and transport simulators. *Computers and Geosciences* 108 (2017), S. 2–7. ISSN: 0098-3004. DOI: 10.1016/j.cageo.2016.09.009.

Kelkar u. a. (2014)

Kelkar, S., Lewis, K., Karra, S., Zyvoloski, G., Rapaka, S., Viswanathan, H., Mishra, P. K., Chu, S., Coblentz, D. & Pawar, R.: A simulator for modeling coupled thermo-hydro-mechanical processes in subsurface geological media. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 70 (2014), S. 569–580. DOI: 10.1016/j.ijrmms.2014.06.011.

Kock u. a. (2016)

Kock, I., Frieling, G. & Navarro, M.: Fluidströmung und Radionuklidtransport in komplexen Endlagerbergwerken: Synthesebericht Teil 1/2: Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager am Beispiel des ERAM. Bd. GRS-399. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2016. ISBN: 978-3-944161-80-8.

Koroleva u. a. (2011)

Koroleva, M., Lerouge, C., Mäder, U., Claret, F. & Gaucher, É. C.: Biogeochemical processes in a clay formation in situ experiment: Part B – Results from overcoring and evidence of strong buffering by the rock formation. *Applied Geochemistry* 26.6 (2011), S. 954–966. ISSN: 0883-2927. DOI: 10.1016/j.apgeochem.2011.03.005.

Kröhn u. a. (2009)

Kröhn, K. P., Stührenberg, D., Herklotz, M., Hemann, U., Lerch, C. & Xie, M.: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager - Phase 1. Bd. GRS-254. GRS-Bericht. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2009. ISBN: 978-3-939355-29-8.

LaForce u. a. (2024)

LaForce, T. u. a.: DECOVALEX-2023 Task F2-Salt Final Report. 2024.

LANL (2025)

LANL: FEHM: Finite Element Heat and Mass Transfer Code. 2025.

Larue u. a. (2013)

Larue, P.-J., Baltes, B., Fischer, H., Frieling, G., Kock, I., Navarro, M. & Seher, H.: Radiologische Konsequenzenanalyse: Bericht zum Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. Bd. GRS-289. GRS-Bericht. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2013. ISBN: 978-3-939355-65-6.

H. Li u. a. (2022)

Li, H., Wang, J., Mao, L., Zhao, S., Jia, M., Liu, Y. & Huang, S.: Safety assessment of Beishan pre-selection area for geological disposal of high-level radioactive waste in China. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 331 (2022), S. 2573–2581. ISSN: 0236-5731. DOI: 10.1007/s10967-022-08300-6.

K. Li u. a. (2006)

Li, K. & Horne, R. N.: Comparison of methods to calculate relative permeability from capillary pressure in consolidated water-wet porous media. *Water resources research* 42.6 (2006).

Lichtner u. a. (2020)

Lichtner, P. C., Hammond, G. E., Lu, C., Karra, S., Bisht, G., Andre, B., Mills, R. T., Kumar, J. & Frederick, J. M.: PFLOTTRAN User Manual. 2020.

Lothenbach u. a. (2019)

Lothenbach, B., Kulik, D. A., Matschei, T., Balonis, M., Baquerizo, L., Dilnesa, B., Miron, G.-D. & Myers, R. J.: Cemdata18: A chemical thermodynamic database for hydrated Portland cements and alkali-activated materials. *Cement and Concrete Research* 115 (2019), S. 472–506. ISSN: 0008-8846. DOI: 10.1016/j.cemconres.2018.04.018.

Luu (2020)

Luu, K.: toughio: Pre- and post-processing Python library for TOUGH. *Journal of Open Source Software* 5.51 (2020), S. 2412. DOI: 10.21105/joss.02412.

Lux u. a. (2021a)

Lux, K.-H., Rutenberg, M. & Feierabend, J.: BenVaSim–International Benchmarking for Verification and Validation of TH2M Simulators with Special Consideration of Fluid Dynamical Processes in Radioactive Waste Repository Systems: Final report. Clausthal-Zellerfeld, Dezember 2021.

Lux u. a. (2015)

Lux, K.-H., Rutenberg, M., Seeska, R., Feierabend, J. & Düsterloh, U.: Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten von tonstein unter Endlagerbedingungen: Teil 2: Physikalische Modellierung, Kopplung von FLAC3D und TOUGH2 sowie numerische Simulationen: BMWi Förderkennzeichen 02E11041. Clausthal-Zellerfeld: TU Clausthal, 2015.

Lux u. a. (2021b)

Lux, K.-H. u. a.: BenVaSim – International Benchmarking for Verification and Validation of TH2M Simulators with Special Consideration of Fluid Dynamical Processes in Radioactive Waste Repository Systems: Synthesis report. Clausthal, Dezember 2021.

Mäder u. a. (2018)

Mäder, U. u. a.: "5-year chemico-physical evolution of concrete–claystone interfaces, Mont Terri rock laboratory (Switzerland)". Mont Terri Rock Laboratory, 20 Years. Hrsg. von P. Bossart & A. G. Milnes. Swiss Journal of Geosciences Supplement (SWISSGEO). Birkhäuser Cham, 2018, S. 309–329. ISBN: 978-3-319-70457-9. DOI: 10.1007/978-3-319-70458-6_16.

Martens u. a. (1999)

Martens, K.-H., Fischer, H., Hofer, E. & Krzykacz-Hausmann, B.: Stochastic and deterministic analyses for a generic repository in rock salt in the EU-Project SPA "Spent Fuel Performance Assessment". Köln, 1999.

Mourzenko u. a. (2012)

Mourzenko, V. V., Thovert, J.-F. & Adler, P. M.: Percolation and permeability of fracture networks in excavated damaged zones. Physical review.

E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics 86.2 Pt 2 (2012), S. 026312. DOI: 10.1103/PhysRevE.86.026312.

Navarro u. a. (2008)

Navarro, M. u. a.: Verfolgung und Bewertung der Fortentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik beim Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern. GRS-A-3418. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH, Juli 2008.

Navarro (2025)

Navarro, M.: Foundations of site selection procedures for deep geological repositories: an argument-based model to explain how site rejection decisions can be justified by inaccurate operationalizations and assessments of long-term protection. Frontiers in Nuclear Engineering Volume 4 (2025). DOI: 10.3389/fnuen.2025.1664370.

Navarro (2018)

Navarro, M.: TOUGH2-GRS Version 2, TOUGH2-MP-GRS Version 0. GRS-505. Köln u. a., September 2018.

Navarro (2020)

Navarro, M.: User Manual, TOUGH 2-GRS Version 3, TOUGH 2-MP-GRS Version 1. Bd. GRS-620. GRS-Bericht. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2020. ISBN: 978-3-949088-06-3.

Navarro u. a. (2021)

Navarro, M., G. Bracke, J. Eckel, G. Frieling, I. Kock, H. Seher & T. Weyand, Hrsg.: Weiterentwicklung und Qualitätssicherung von Modellierungswerkzeugen zur Durchführung und Bewertung von Sicherheitsanalysen im Standortauswahlverfahren: Forschungskennziffer 4718E03260. Bd. GRS-622. GRS-Bericht. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Februar 2021. ISBN: 978-3-949088-08-7.

Navarro u. a. (2018a)

Navarro, M., J. Eckel, H. Fischer, G. Frieling, S. Hotzel, I. Kock, A. Krischer, H. Seher, S. Uhlmann & T. Weyand, Hrsg.: Entwicklung von Methoden zum Nachweis der Betriebs- und Langzeitsicherheit von Endlagern: Abschlussbericht des Vor-

habens 4715E03230. Bd. GRS-514. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, September 2018. ISBN: 978-3-946607-99-1.

Navarro u. a. (2018b)

Navarro, M., Eckel, J., Fischer, H., Hotzel, S. & Kock, I.: Test Handbook, TOUGH2-GRS Version 2, TOUGH2-MP-GRS Version 0. Bd. GRS-402. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2018. ISBN: 978-3-944161-83-9.

Navarro u. a. (2015)

Navarro, M., Seher, H., Hotzel, S. & Eckel, J.: Quality Assurance for the TOUGH2 Family of Codes Using the Code SITA. Proceedings of the TOUGH Symposium 2015. Hrsg. von L. Blanco-Martin, C. Doughty, S. Finsterle, M. Reagan, J. Rutqvist, C. Valladao & L. Zheng. 2015, S. 239–246.

Navarro u. a. (2019)

Navarro, M., Weyand, T., Eckel, J. & Fischer, H.: Indikatoren zur Bewertung des Einschlusses und der Isolation mit exemplarischer Anwendung auf ein generisches Endlagersystem mit dem Wirtsgestein Tongestein. GRS-A-3985. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH, November 2019.

NNDS (Dezember 2025)

NNDS: Nuclear Data Sheet (NuDat 3.0). Dezember 2025.

Nole u. a. (2022)

Nole, M., Beskardes, G. D., Fukuyama, D., Leone, R. C., Mariner, P., Park, H. D., Paul, M., Salazar, A., Hammond, G. E., Lichtner, P. C. u. a.: PFLOTRAN Development FY2022. Sandia National Laboratories (SNL-NM), Albuquerque, NM (United States), August 2022. DOI: 10.2172/1879616.

OECD-NEA (2004)

OECD-NEA: Post-Closure Safety Case for Geological Repositories: Nature and purpose. Bd. NEA No. 3679. Radioactive Waste Management. Paris, Januar 2004. ISBN: 92-64-02075-6.

Park u. a. (2024)

Park, H. D., Fukuyama, D. E., Leone, R. C., Paul, M. J., Salazar, A., Madsen, C. F. & Rechard, R. P.: FY24 Advancements in PFLOTRAN Development for GDSA Framework. Sandia National Laborato-

ries (SNL-NM), Albuquerque, NM (United States), September 2024. DOI: 10.2172/2462969.

Parkhurst u. a. (2013)

Parkhurst, D. L. & Appelo, C. A. J.: Description of Input and Examples for PHREEQC Version 3—A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations. 6-A43. Denver: U.S. Geological Survey, 1. Januar 2013.

Parkhurst u. a. (2021)

Parkhurst, D. L. & Appelo, C. A. J.: PHREEQC. 2. Dezember 2021.

Parkhurst u. a. (2025)

Parkhurst, D. L. & Appelo, C. A. J.: PHREEQC. 7. Januar 2025.

Pearson u. a. (2003)

Pearson, F. J., D. Arcos, A. Bath, J.-Y. Boisson, A. M. Fernández, H.-E. Gäbler, É. C. Gaucher, L. Griffault, P. Hernán & H. N. Waber, Hrsg.: Mont Terri Project – Geochemistry of Water in the Opalinus Clay Formation at the Mont Terri Rock Laboratory. Bd. 5. Reports of the FOWG. Geology series. Bern: Swiss Federal Office for Water and Geology (FOWG), 2003. ISBN: 3-906723-59-3.

Peiffer u. a. (2011)

Peiffer, F., McStocker, B., Gründler, D., Ewig, F., Thomauske, B., Havenith, A. & Kettler, J.: Abfallspezifikation und Mengengerüst. Basis Ausstieg aus der Kernenergienutzung (Juli 2011): Bericht zum Arbeitspaket 3, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. Bd. GRS-278. GRS-Bericht. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2011. ISBN: 978-3-939355-54-0.

Pflotran (2026a)

Pflotran: PFLOTRAN v6.0 documentation - Changes in PFLOTRAN 6.0. 2026.

Pflotran (2026b)

Pflotran: PFLOTRAN v6.0 documentation - Developer Guide - Pc-Saturation & Relative Permeability Functions. 2026.

Pflotran (2026c)

Pflotran: PFLOTRAN v6.0 documentation - Theory Guide - Introduction. 2026.

Pflotran (2026d)

Pflotran: PFLOTTRAN v6.0 documentation - User's Guide. 2026.

Pruess u. a. (1999)

Pruess, K., Oldenburg, C. & Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2. Lawrence Berkeley National Laboratory, 1999.

Rasouli u. a. (2015)

Rasouli, P., Steefel, C. I., Mayer, K. U. & Rolle, M.: Benchmarks for multicomponent diffusion and electrochemical migration. Computational Geosciences 19.3 (2015), S. 523–533.

Rodríguez u. a. (2023)

Rodríguez, J., Colàs, E. & García, D.: Track-changes and track-error document: From version 11a to version 12a. ThermoChimie, Juli 2023.

Rousseau (2022)

Rousseau, M.: Salome PFLOTTRAN Interface. 2022.

Rücker (2025)

Rücker, C.: Entwicklung einer hauseigenen Open Source THM-Modellierungstoolbox (OSTHM). BASE-011/25. Berlin: Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (BASE), Dezember 2025.

Rutherford u. a. (1902)

Rutherford, E. & Soddy, F.: LXIV. The cause and nature of radioactivity .–Part II. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science 4.23 (1902), S. 569–585. ISSN: 1941-5982. DOI: 10.1080/14786440209462881.

Satish Balay u. a. (2023)

Satish Balay, Shrirang Abhyankar, Mark F. Adams, Steven Benson & Jed Brown: PETSc/TAO Users Manual: Revision 3.18. Argonne National Lab.(ANL), Argonne, IL (United States), 2023.

SCK-CEN (2024)

SCK-CEN: BN Experiment: chemical and microbiological results - status phase 29. TN 2024-74. Mol, Belgium: Studiecentrum voor Kernenergie Centre D'Etude De L'Energie Nucleaire, Dezember 2024.

Seher (2013)

Seher, H.: Zusammenstellung der Inventare zur Modellierung: Memo im Arbeitspaket 10: Vorläu-

fige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. Köln: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH, 2013.

SNL (2025)

SNL: PFLOTTRAN v6.0 documentation - User's Guide - Regression Test Manager. 2025.

SNL (2024)

SNL: Regression tests for anisotropic tortuosity. 3. Januar 2024.

swisstopo (2021)

swisstopo: Mont Terri Project: Agreed Programme Proposal for Phase 27: Bitumen-Nitrate-Clay interaction experiment. Wabern, Schweiz: Bundesamt für Landestopografie, Juni 2021.

ThermoChimie (2023)

ThermoChimie: ThermoChimie extracted files: supporting documentation: Database version: 12a. Châtenay-Malabry, France: ThermoChimie, 22. August 2023.

ThermoChimie (2022)

ThermoChimie: ThermoChimie extracted files: supporting documentation: Version 11a for PHREEQC 3.7.0. Châtenay-Malabry, France: ThermoChimie, 19. Mai 2022.

Thoenen u. a. (2014)

Thoenen, T., Hummel, W., Berner, U. & Curti, E.: The PSI/Nagra Chemical Thermodynamic Database 12/07. 14-04. Villingen, Switzerland, Dezember 2014.

Thomauske (2016)

Thomauske, B.: Abschätzung des Zeitbedarfs bis zur Inbetriebnahme des Endlagers. AG3-119. Berlin: Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe, 3. April 2016.

Thomauske u. a. (2016)

Thomauske, B. & Kudla, W.: Zeitbedarf für das Standortauswahlverfahren und für die Errichtung eines Endlagers. K-Drs. 267. Berlin: Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe, 22. Juni 2016.

Wersin u. a. (2024)

Wersin, P., Aschwanden, L. & Kiczka, M.: Cation exchange parameters for Opalinus Clay and its confining units. Applied Geochemistry 167 (2024). ISSN: 0883-2927. DOI: 10.1016/j.apgeochem.2024.106003.

Weyand (2024)

Weyand, T.: Status update: geochemical modelling (BN experiment). digital, 13. November 2024.

Weyand u. a. (2026)

Weyand, T., Bleyen, N. & De Cannière, P.: Geochemical modelling to assess the consequences of a pH increase in the Bitumen-Nitrate-Clay interaction experiment at the Mont Terri Rock Laboratory. Environ. Earth Sci. 85.8 (April 2026).

Weyand u. a. (2023a)

Weyand, T. & Jendras, M.: How to increase the in situ pH in future experiments: first modelling results. Saint-Ursanne, 26. Januar 2023.

Weyand u. a. (2024a)

Weyand, T. & Jendras, M.: Update on how to increase pH in future experiments: modelling results. Mol, Belgium, 25. Januar 2024.

Weyand u. a. (2023b)

Weyand, T., Jendras, M., Bleyen, N., Hendrix, K. & Borkel, C.: Estimation of mineral precipitations under varying pH conditions in the Bitumen-Nitrate-Clay interaction (BN) experiment. Porrentruy, 24. Januar 2023.

Weyand u. a. (2023c)

Weyand, T., Jendras, M., Bleyen, N., Hendrix, K. & Borkel, C.: Modelling the geochemical behaviour of aqueous solutions in the Opalinus Clay as part of the Mont Terri BN Experiment using PHREEQC. Geophysical Research Abstracts (2023). DOI: 10.5194/egusphere-egu23-2875.

Weyand u. a. (2024b)

Weyand, T., Jendras, M., Hendrix, K. & Bleyen, N.: Geochemistry of pore waters at elevated pH within the Bitumen-Nitrate-Clay interaction (BN) experiment. Porrentruy, 7. Mai 2024.

Weyand u. a. (2024c)

Weyand, T., Jendras, M., Hendrix, K. & Bleyen, N.: Geochemistry of pore waters in Opalinus Clay at the Mont Terri Rock Laboratory within the Bitumen-Nitrate-Clay interaction experiment. Book of Abstracts. November 2024, S. 468–469. DOI: 10.5281/zenodo.15071784.

WTI (2008)

WTI: CASTOR KNK: Datenblätter für die Behälterbelastungen 1 bis 4. T/WTI/o8/o29. Jülich, 2008.

Zhu u. a. (2023)

Zhu, J., Wang, T., Zhang, H. & Zhou, G.: Alkaline buffer characteristics and mechanism of Gao-miaozi bentonite in high-level radioactive waste repository. Environmental Earth Sciences 82 (2023). ISSN: 1866-6280. DOI: 10.1007/s12665-023-10928-w.

Zyvoloski (2007)

Zyvoloski, G.: FEHM: A control volume finite element code for simulating subsurface multi-phase multi-fluid heat and mass transfer. LAUR-07-3359. Earth and Environmental Sciences Division, Los Alamos National Laboratory, März 2007.

A Anhang

A.1 Anwendung der Radionuklidauswahlkriterien

Die Tabelle A1 zeigt die in Kap. 9.1.3 eingeführten Auswahlkriterien angewendet auf die in *Peiffer u. a. (2011)* aufgeführten Radionuklide.

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (*Peiffer u. a. 2011*).

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	>Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
H-3	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Be-10	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Be-7	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
C-14	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Na-22	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Al-26	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Si-32	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
P-32	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
S-35	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cl-36	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Ar-37	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ar-39	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Ar-42	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
K-40	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
K-42	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ca-41	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Ca-45	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sc-46	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
V-49	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
V-50	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Mn-53	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Mn-54	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Fe-55	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011).
(Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Fe-59	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Fe-60	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Co-56	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Co-57	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Co-58	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Co-60	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Ni-59	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Ni-63	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Zn-65	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ge-76	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
As-73	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Se-75	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Se-79	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Se-82	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Br-82	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Kr-81	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Kr-85	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Rb-83	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Rb-84	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Rb-87	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Nein
Sr-85	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sr-89	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sr-90	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Y-88	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Y-89m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Y-90	Nein	Ja	Ja	Ja		Nein	Nein	Ja
Y-91	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Zr-93	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011).
(Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Zr-95	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Zr-96	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Nb-91	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Nb-92	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Ja
Nb-93m	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Nb-94	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Nb-95	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Nb-95m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Nb-96	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Mo-93	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Mo-100	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Tc-97	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tc-97m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tc-98	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Tc-99	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Tc-100	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ru-103	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ru-106	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Rh-101	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Rh-102	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Rh-102m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Rh-103m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Rh-106	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pd-107	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Ag-108	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011).
(Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Ag-108m	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Ag-109m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ag-110	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ag-110m	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cd-109	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cd-113	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Cd-113m	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cd-115m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
In-113m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
In-114	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
In-114m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
In-115	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
In-115m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sn-113	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sn-119m	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sn-121	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sn-121m	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Sn-123	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sn-126	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Sb-124	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011).
(Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Sb-125	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sb-126	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sb-126m	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Te-121	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Te-121m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Te-123	-	Nein	-	-		Nein	Nein	-
Te-123m	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Te-125m	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Te-127	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Te-127m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Te-128	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Te-129	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Te-129m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Te-130	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
I-125	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
I-129	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
I-130	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Xe-127	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cs-134	Nein	Ja	Ja	Nein		Nein	Nein	Ja
Cs-135	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Cs-137	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Ba-133	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ba-137m	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011).
(Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
La-137	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
La-138	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Ce-139	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ce-141	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ce-142	-	Ja	-	-		Nein	Nein	-
Ce-144	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pr-144	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pr-144m	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Nd-144	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Nd-150	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Pm-143	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pm-144	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pm-145	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pm-146	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pm-147	Nein	Ja	Ja	Ja		Nein	Nein	Ja
Pm-148	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pm-148m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pm-150	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sm-145	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Sm-146	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011).
(Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Sm-147	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Nein
Sm-148	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Sm-149	-	Nein	-	-		Nein	Nein	-
Sm-151	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Eu-149	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Eu-150	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Eu-152	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Eu-154	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Eu-155	Nein	Ja	Ja	Nein		Nein	Nein	Ja
Gd-150	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Gd-151	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Gd-152	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Gd-153	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tb-157	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tb-158	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tb-160	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Dy-159	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ho-163	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ho-166m	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Ja	Ja
Tm-168	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tm-170	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tm-171	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Lu-176	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Nein
Lu-177	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Lu-177m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011).
(Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Hf-174	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Nein
Hf-181	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Hf-182	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Ja
Ta-179	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ta-180	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ta-180m	-	Nein	-	-		Nein	Nein	-
Ta-182	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
W-181	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
W-185	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
W-188	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Re-183	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Re-184	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Re-184m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Re-186	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Re-186m	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Re-187	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Re-188	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Os-185	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Os-186	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Nein
Os-194	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ir-192	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ir-192m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ir-194	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ir-194m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011). (Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Pt-190	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Nein
Pt-193	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Hg-203	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tl-202	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tl-204	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tl-206	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tl-207	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tl-208	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tl-209	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Tl-210	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pb-202	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pb-204	-	Nein	-	-		Nein	Nein	-
Pb-205	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Ja
Pb-209	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pb-210	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pb-211	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pb-212	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pb-214	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bi-207	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bi-208	Ja	Ja	Ja	Nein		Nein	Nein	Ja
Bi-210	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bi-210m	Ja	Nein	Ja	Ja		Nein	Nein	Ja
Bi-211	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bi-212	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bi-213	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bi-214	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bi-215	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011). (Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Po-210	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Po-211	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Po-212	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Po-213	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Po-214	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Po-215	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Po-216	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Po-218	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
At-217	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
At-219	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Rn-219	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Rn-220	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Rn-222	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Fr-221	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Fr-223	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Fr-224	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ra-223	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ra-224	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ra-225	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ra-226	Ja	Ja	Nein	Nein	Uran	Ja	Ja	Ja
Ra-228	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ac-225	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Ac-227	Ja	Ja	Nein	Nein	Actinium	Ja	Ja	Ja
Ac-228	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Th-227	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Th-228	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Th-229	Ja	Ja	Ja	Ja	Neptuni- um	Ja	Ja	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011).
(Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfalls- reihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Th-230	Ja	Ja	Ja	Ja	Uran	Ja	Ja	Ja
Th-231	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Th-232	Ja	Ja	Ja	Ja	Thorium	Ja	Ja	Nein
Th-234	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pa-231	Ja	Ja	Ja	Ja	Actinium	Ja	Ja	Ja
Pa-232	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pa-233	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pa-234m	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pa-234	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
U-232	Ja	Ja	Ja	Ja	Thorium	Ja	Ja	Ja
U-233	Ja	Ja	Ja	Ja	Neptunium	Ja	Ja	Ja
U-234	Ja	Ja	Ja	Ja	Uran	Ja	Ja	Ja
U-235	Ja	Ja	Ja	Ja	Actinium	Ja	Ja	Nein
U-236	Ja	Ja	Ja	Ja	Thorium	Ja	Ja	Ja
U-237	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
U-238	Ja	Ja	Ja	Ja	Uran	Ja	Ja	Nein
U-240	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Np-235	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Np-236	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Np-237	Ja	Ja	Ja	Ja	Neptunium	Ja	Ja	Ja
Np-238	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Np-239	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Np-240m	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Np-240	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pu-236	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja

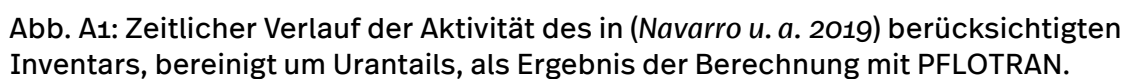
Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011). (Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfallsreihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Pu-237	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pu-238	Ja	Ja	Ja	Ja	Uran	Ja	Ja	Ja
Pu-239	Ja	Ja	Ja	Ja	Actinium	Ja	Ja	Ja
Pu-240	Ja	Ja	Ja	Ja	Thorium	Ja	Ja	Ja
Pu-241	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Pu-242	Ja	Ja	Ja	Ja	Uran	Ja	Ja	Ja
Pu-243	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Pu-244	Ja	Nein	Ja	Ja	Thorium	Ja	Ja	Ja
Pu-246	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Am-241	Ja	Ja	Ja	Ja	Neptunium	Ja	Ja	Ja
Am-242m	Ja	Ja	Ja	Ja	Uran	Ja	Ja	Ja
Am-242	Nein	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Am-243	Ja	Ja	Ja	Ja	Actinium	Ja	Ja	Ja
Am-245	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Am-246	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cm-241	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cm-242	Nein	Ja	Ja	Ja		Nein	Nein	Ja
Cm-243	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Cm-244	Ja	Ja	Ja	Ja		Ja	Nein	Ja
Cm-245	Ja	Ja	Ja	Ja	Neptunium	Ja	Ja	Ja

Tab. A1: Auswahlkriterien aus Kap. 9.1.3 angewendet auf die Radionuklide aus (Peiffer u. a. 2011). (Fortsetzung)

RN	$t_{1/2} > 5 \text{ a}$	$A_{RN} > 10^9 \text{ Bq}$	$n_{RN}/n_{tot} > 10^{-9}$	$m_{RN}/m_{tot} > 10^{-9}$	Zerfallsreihe	ERLa	VSG AP 10	$t_{1/2} < 10^8 \text{ a}$
Cm-246	Ja	Ja	Ja	Ja	Uran	Ja	Ja	Ja
Cm-247	Ja	Nein	Ja	Ja	Actinium	Ja	Ja	Ja
Cm-248	Ja	Ja	Ja	Ja	Thorium	Ja	Ja	Ja
Cm-250	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bk-247	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bk-248	Ja	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bk-249	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Bk-250	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cf-248	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cf-249	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cf-250	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cf-251	Ja	Ja	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cf-252	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Cf-254	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Es-252	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja
Es-254	Nein	Nein	Nein	Nein		Nein	Nein	Ja

A.2 Inventarvergleich MARNIE/PFLOTRAN



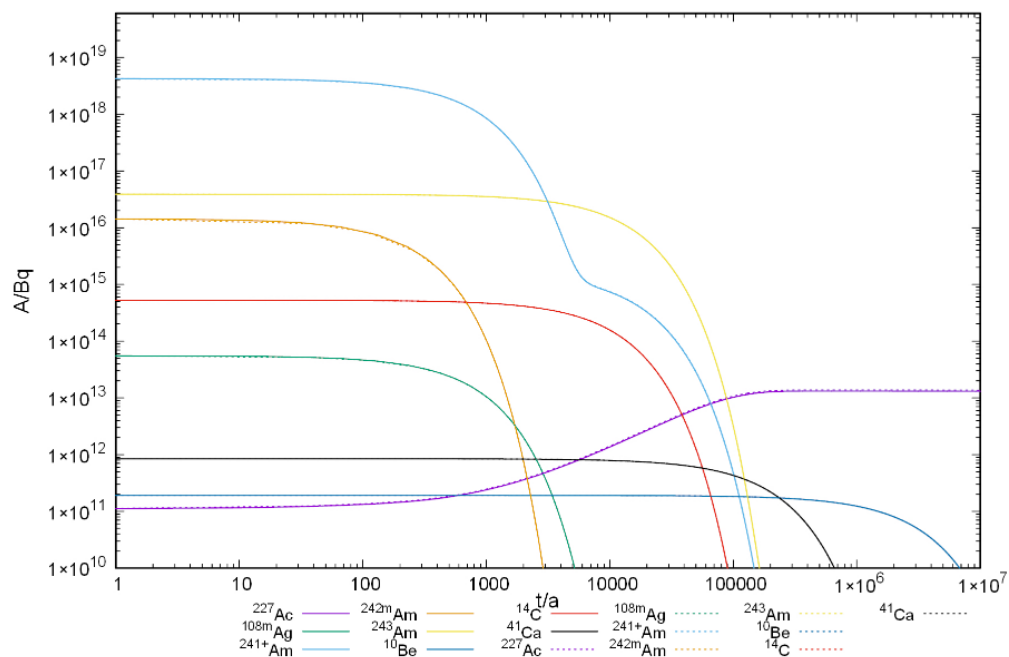


Abb. A2: Zeitlicher Verlauf der Aktivität für ausgewählte Radionuklide als Ergebnis der Berechnung mit PFLOTRAN (durchgezogene Linien) und MARNIE (gestrichelte Linien).

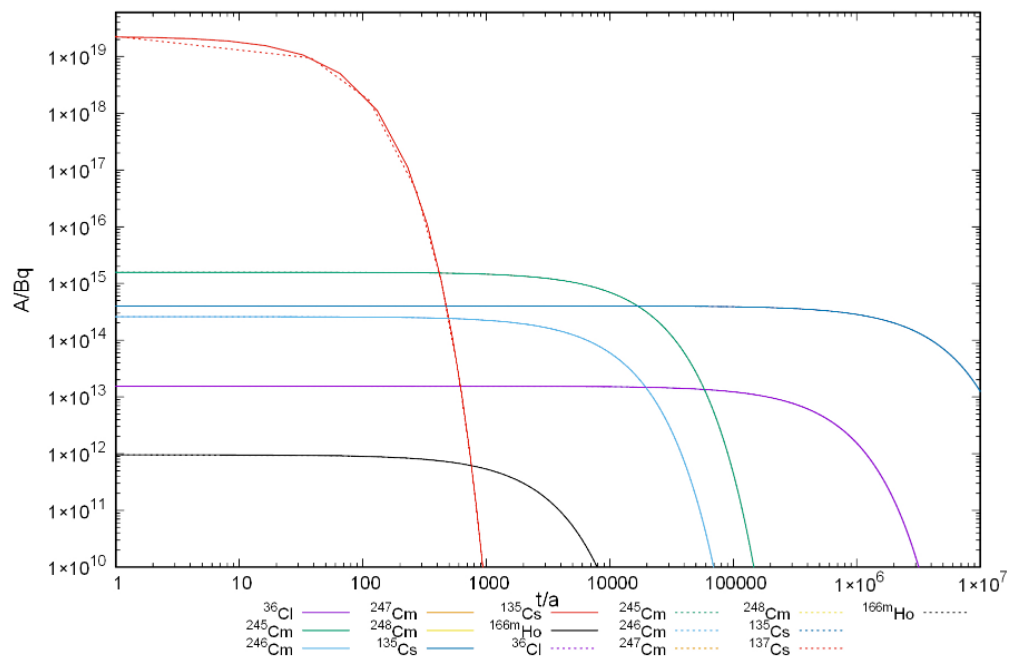


Abb. A3: Zeitlicher Verlauf der Aktivität für ausgewählte Radionuklide als Ergebnis der Berechnung mit PFLOTRAN (durchgezogene Linien) und MARNIE (gestrichelte Linien).

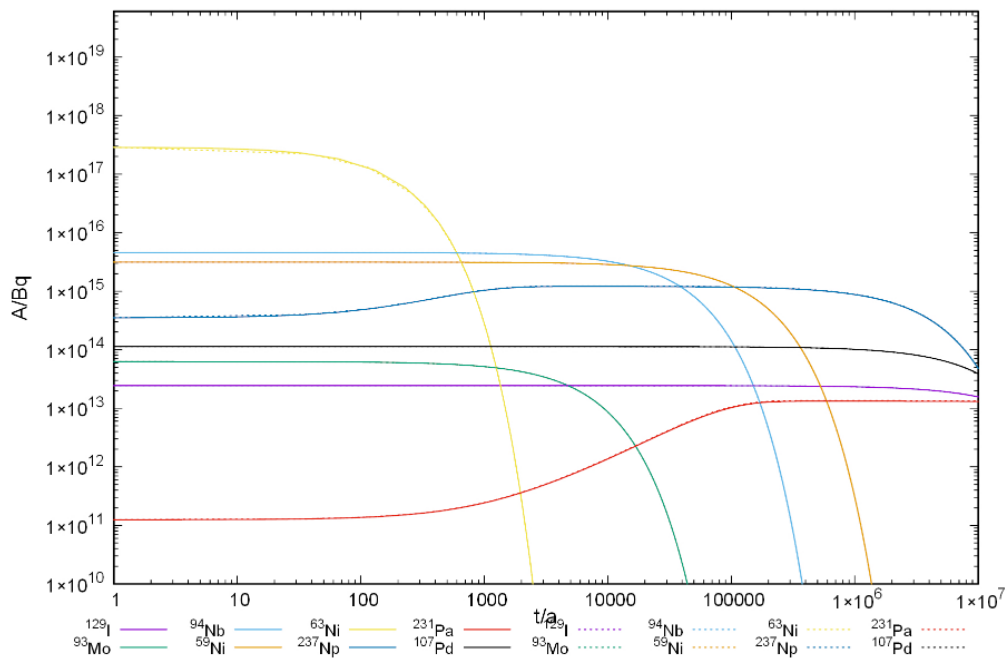


Abb. A4: Zeitlicher Verlauf der Aktivität für ausgewählte Radionuklide als Ergebnis der Berechnung mit PFLOTRAN (durchgezogene Linien) und MARNIE (gestrichelte Linien).

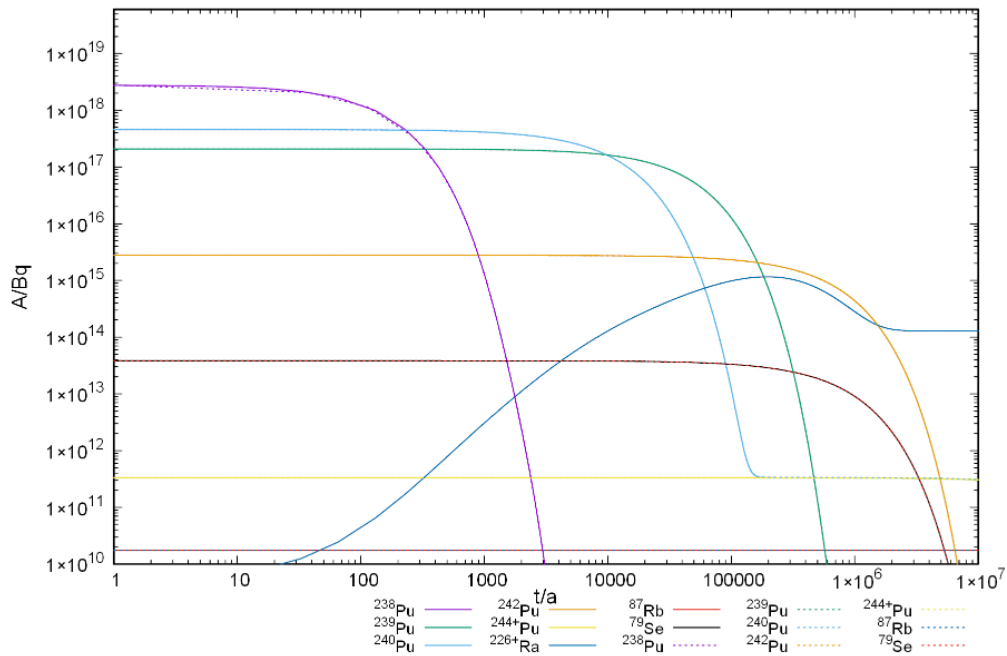


Abb. A5: Zeitlicher Verlauf der Aktivität für ausgewählte Radionuklide als Ergebnis der Berechnung mit PFLOTRAN (durchgezogene Linien) und MARNIE (gestrichelte Linien).

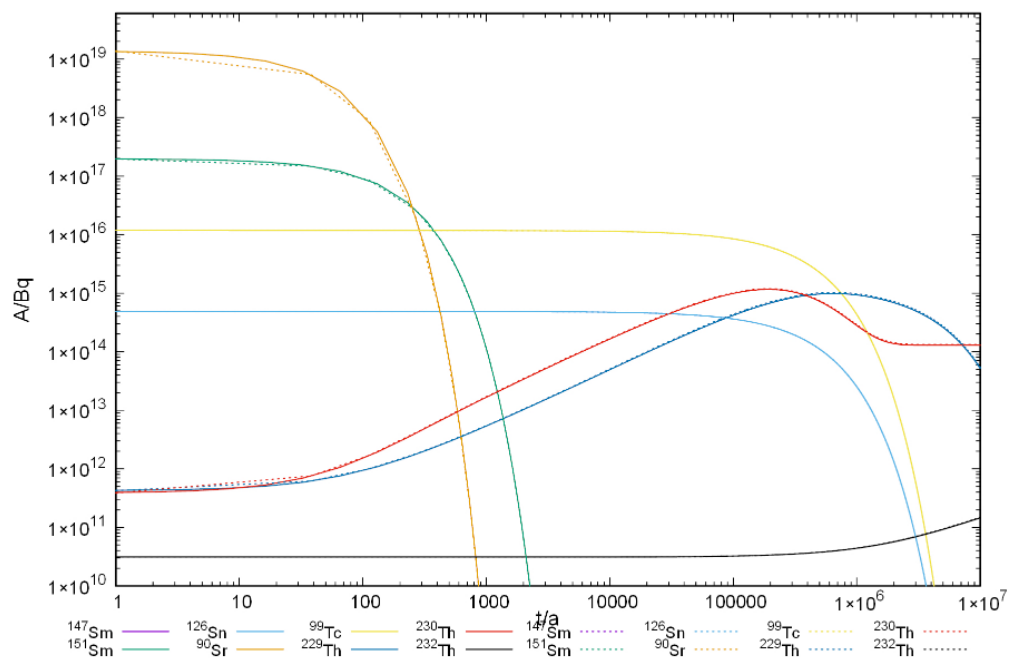
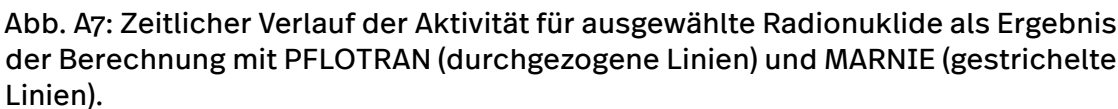


Abb. A6: Zeitlicher Verlauf der Aktivität für ausgewählte Radionuklide als Ergebnis der Berechnung mit PFLOTRAN (durchgezogene Linien) und MARNIE (gestrichelte Linien).



Die Ergebnisse des Forschungsprojekts wurden in folgenden Beiträgen veröffentlicht

- T. Weyand, N. Bleyen, P. De Cannière
Geochemical modelling to assess the consequences of a pH increase in the Bitumen-Nitrate-Clay interaction experiment at the Mont Terri Rock Laboratory
Environmental Earth Science 85.8 (April 2026).
- J. Eckel, T. Weyand, G. Frieling und M. Navarro
Evaluation of uncertainties related to isolation and containment of a containment-providing rock zone, in Vorbereitung.

Konferenzbeiträge

- J. Eckel, M. Navarro und T. Weyand
Entwicklung und Verifizierung von Rechenprogrammen zur Bewertung von Langzeitsicherheitsanalysen (ERLa) (Poster)
Tage der Standortauswahl, Aachen, 2022.
- T. Weyand und Jendras, M.
How to increase the in situ pH in future experiments: first modelling results (Poster)
Mt. Terri Project Technical Meeting TM-40, Saint-Ursanne, 2023.
- T. Weyand, M. Jendras, N. Bleyen, K. Hendrix und C. Borkel
Estimation of mineral precipitations under varying pH conditions in the Bitumen-Nitrate-Clay interaction (BN) experiment (Vortrag)
Mt. Terri Project Technical Discussion TD-36, Porrenturry, 2023.
- T. Weyand, M. Jendras, N. Bleyen, K. Hendrix und C. Borkel
Modelling the geochemical behaviour of aqueous solutions in the Opalinus Clay as part of the Mont Terri BN Experiment using PHREEQC (Poster)
EGU General Assembly, Wien, 2023.
- K. Hendrix, N. Bleyen, K. Mijndendonckx, V. Van Gompel, A. Albrecht, Y. Linard, P. De Cannière, M. Surkova, C. Wittebroodt, J. Small, T. Weyand, M. Jendras und E. Valcke
A long-running in situ experiment in clay: 12 years of the Bitumen-Nitrate-Clay interaction experiment at Mont Terri rock laboratory (Poster)
safeND, Berlin, 2023.
- J. Eckel und M. Navarro
Further development and verification of computer programs for the review of long-term safety analysis (Poster)
EGU General Assembly 2024, Wien, 2024.
- T. Weyand und M. Jendras
Mineral precipitations and dissolutions at elevated pH within the Bitumen-Nitrate-Clay interaction (BN) experiment (Vortrag)
Mt. Terri Project Technical Discussion TD-42, Porrenturry, 2024.
- T. Weyand, M. Jendras, K. Hendrix und N. Bleyen
Geochemistry of pore waters in Opalinus Clay at the Mont Terri Rock Laboratory within the Bitumen-Nitrate-Clay interaction experiment (Poster)
9th Clay Conference, Hannover, 2024.

- J.Eckel
Code development and verification for the review of long-term safety analyses (Poster)
 EGU General Assembly 2025, Wien, 2025.
- J.Eckel
Code development and verification for the review of long-term safety analyses (Vortrag)
 safeND, Berlin, 2025.
- J. Eckel, T. Weyand, G. Frieling und M. Navarro
Ungewissheitsbetrachtungen zur Einschluss- und Isolationswirkung eines einschlusswirksamen Gebirgsbereichs (Poster)
 5. Tage der Standortauswahl, Leipzig, 2026.
- J. Eckel, T. Weyand, G. Frieling und M. Navarro
Evaluation of uncertainties related to isolation and containment of a containment-providing rock zone (Vortrag)
 EGU General Assembly 2026, Wien, 2026.