

Dr. Christoph Behrens, Merle Bjorge, Alexander Renz, Paulina Müller, Dr. Marlene Gelleszun, Dr. Shorash Miro, Dr. Robert Seydewitz, Dr. Phillip Kreye, Dr. Wolfram Rühaak / Bereich Standortauswahl

## 1. Numerische Modelle

Numerische Modelle, insbesondere Modelle von physikalischen Prozessen, spielen eine wichtige Rolle bei der Bewertung der Sicherheit eines Endlagerstandorts, so auch bei den Sicherheitsuntersuchungen im Standortauswahlverfahren zur Ermittlung eines Standorts für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (StandAG; Hoyer et al. 2021). Modelle bilden die Realität zu einem gewissen Grad ab (Abb. 1) und ermöglichen es so, in vielfältiger Weise etwas über die realen Systeme zu erfahren – häufig in Form einer Prognose. Sie werden beispielsweise dafür verwendet, den Transport von Radionukliden im Untergrund quantitativ zu beschreiben (Behrens et al. 2023, Schafmeister & Schäfer 2024), tiefe Grundwasserströmungen in einem Gebiet abzubilden, oder die geomechanische Integrität der geologischen und geotechnischen Barrieren zu bewerten. In Behrens et al. 2024 diskutieren wir die prinzipiellen Möglichkeiten und Grenzen solcher Modelle.

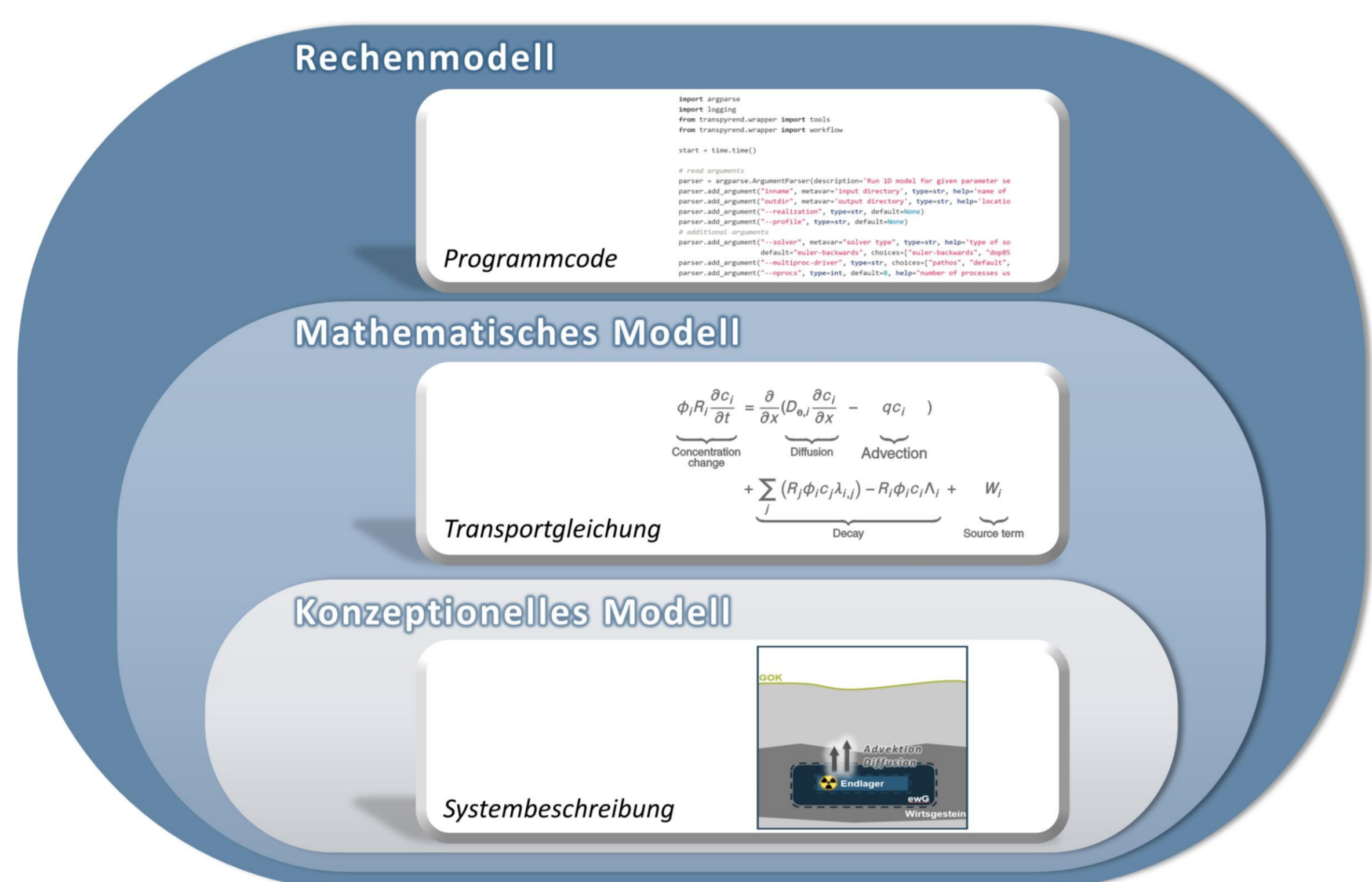


Abb. 1: Betrachtete Modelltypen. Quelle: Behrens et al. 2024

## 2. Der Nutzen von Modellen

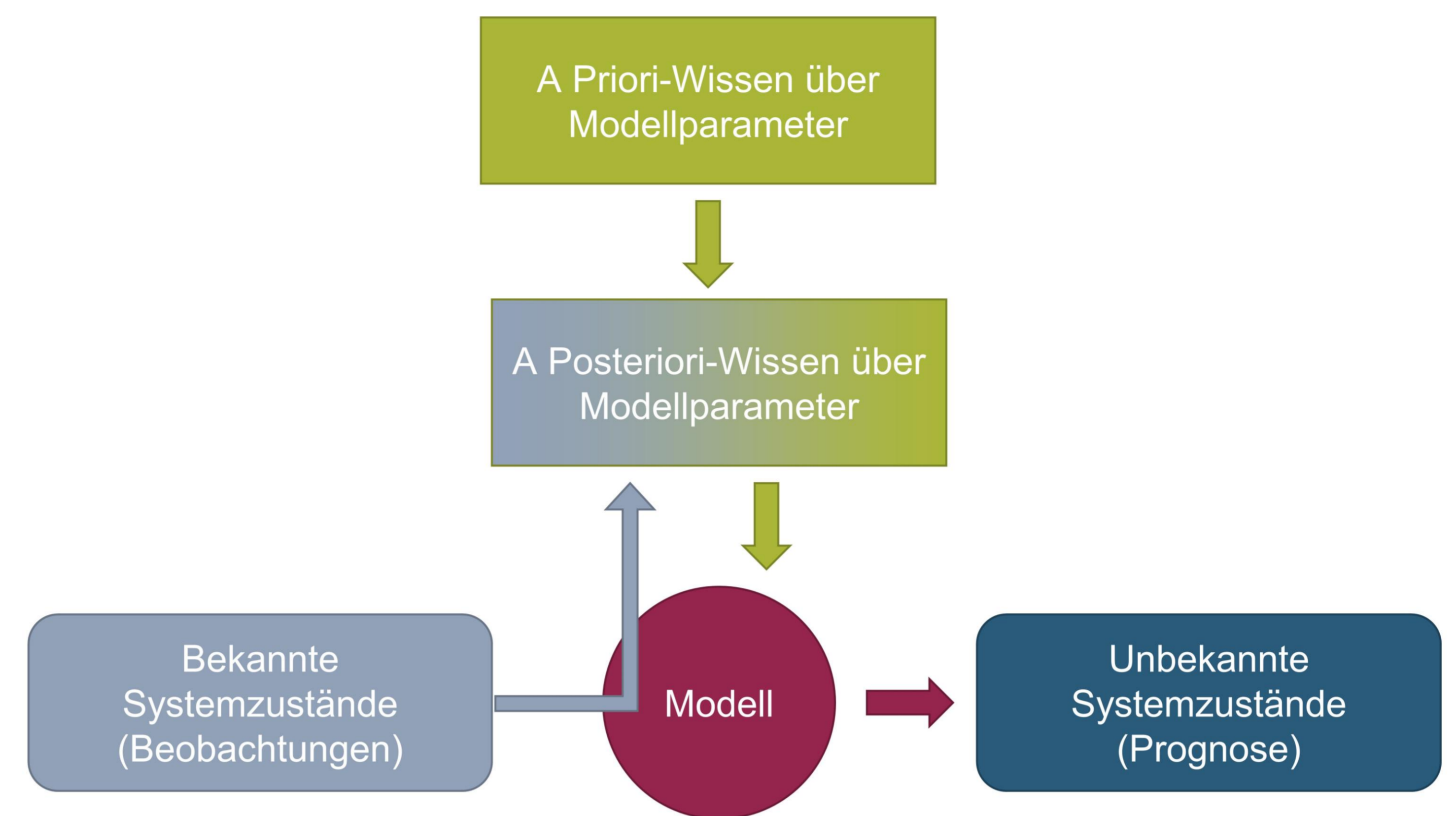


Abb. 2: Inverse Modellierung. Quelle: Behrens et al. 2024

Die epistemische Nützlichkeit eines Modells hängt eng mit seinem Modell- oder Verwendungszweck zusammen. Modelle können in unterschiedlicher Weise nützlich sein; zum einen können Modelle zur Prognose genutzt werden, andererseits können sie das Systemverständnis als solches verbessern (Abb. 2). Weiterhin können sie im Rahmen der sogenannten inversen Modellierung auch genutzt werden, um Wissen über zuvor unbekannte Systemparameter zu gewinnen. Bei der Verwendung von Modellen ist immer zu berücksichtigen, unter welchen Rahmenbedingungen und zu welchem Zweck ein bestimmtes Modell entwickelt wurde, um eine Über- oder Fehlinterpretation zu vermeiden.

## 3. Transparente Modelle

Das Standortauswahlverfahren in Deutschland legt einen besonders starken Fokus auf Transparenz und Nachvollziehbarkeit seitens der Öffentlichkeit. Dieser Fokus ist sowohl im Standortauswahlgesetz verankert, als auch Teil des Selbstverständnisses der BGE als Vorhabenträgerin. Der Transparenzanspruch betrifft auch numerische Modelle, besonders insofern sie entscheidungsrelevante Informationen liefern. Die Konzepte *Open-Source* und *Open-Data*, die in den Fachwissenschaften große Verbreitung finden, können ihren Beitrag dazu leisten, den Transparenzgedanken mit Leben zu füllen. Beide Konzepte betreffen numerische Modelle in unterschiedlicher Weise.

**Open-Source:** Der Programmcode, der das numerische Modell implementiert, stellt Software dar, die Gegenstand einer Open-Source-Veröffentlichung sein kann. Allgemeiner können Auswerteskripte, Diagramme und Tabellen, die in der Analyse von Modellergebnissen relevant sind, im Sinne von Open-Science veröffentlicht werden. Insbesondere im Kontext von Reproducible Science stellt sich auch die Frage nach der Langzeitarchivierung von Code.

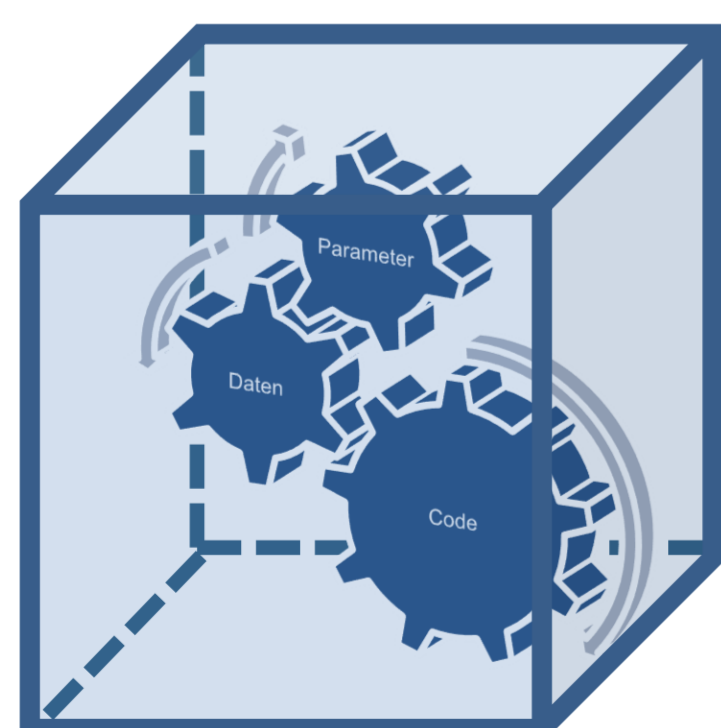


Abb. 3: Symbolbild Transparentes Modell. Quelle: BGE

Auch proprietäre Software kann unter gewissen Umständen relativ transparent eingesetzt werden. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn die Aus- und Eingabeformate der jeweiligen Software interoperabel gestaltet sind, also auch mit Open-Source-Software gelesen werden können.

Das Ziel eines vollständig transparenten Modells (Abb. 3) ist zunächst ein Idealbild, dessen Verwirklichung eine komplexe Aufgabe darstellt. Dies betrifft auf der einen Seite die Veröffentlichung von Code und Daten selbst (s. etwa OpenWorkflow-Projekt, Lehmann et al. 2024), und auf der anderen Seite auch die begleitende Kommunikation für unterschiedliche Zielgruppen.

**Open-Data:** Geometrien und Parameter (Abb. 4) sind Daten, die ggf. veröffentlicht werden sollten. Wenn sich Geometrien und Parameter auf Messdaten oder geologische Karten beziehen, so stellen diese ebenfalls Daten dar.

Tiefe	Radionuklidtransport	Dokumentation (z. B. Datenbank)		
		Parameter	im Modell verwendeter Wert	Quelle
0	Wirtsgestein	Porosität	15 %	Messwerte
200		Diffusionskoeffizient	$10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$	Annahme
400		Sorptionskoeffizient	$0,01 \text{ m}^3/\text{kg}$	Workflow
600				Parameter X
800				Parameter Y
1000				Parameter ...

Abb. 4: Ein vereinfachtes Beispiel für Transparenz in der Parameterbelegung. Verändert nach: Behrens et al. 2024

Forschungsprojekte, die von der BGE beauftragt wurden bzw. werden, sind darauf ausgelegt, eine nachhaltige Nutzung von Software und Ergebnissen zu gewährleisten (Abb. 5). Eine weitgehende Veröffentlichung von Methoden und Daten wird auch hier angestrebt.

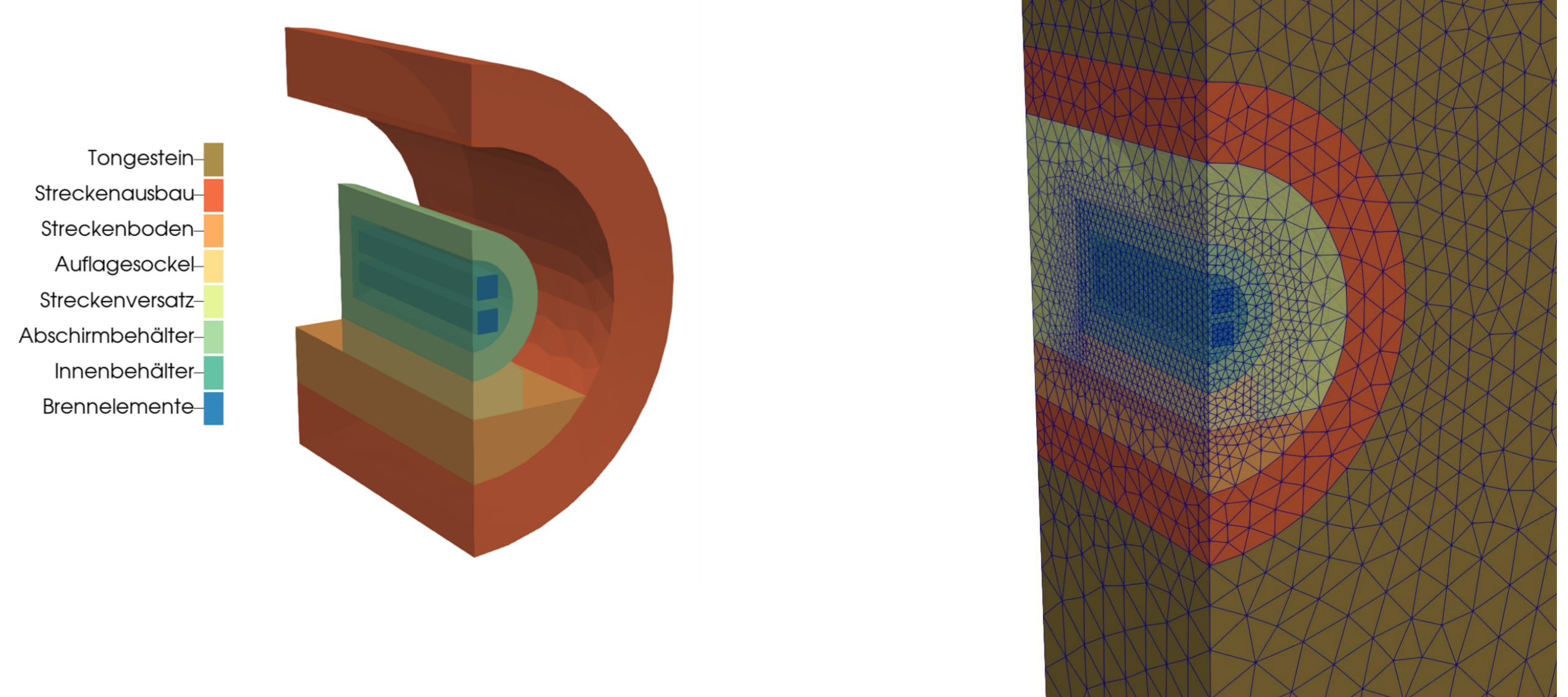


Abb. 5: Beispielbild aus dem Forschungsprojekt Open Workflow: numerische Simulation (FEM) eines 3D-Quartelmodells der vorläufigen Endlagerauslegung in der Open-Source Software „OpenGeoSys“. Das Modell dient der Optimierung der Behälterbeladung, um die zulässige Temperatur an der Behälteraußenwand einzuhalten. Quelle: BGE

**Literatur**  
 Behrens, C., Lujendijk, E., Kreye, P. et al., TransPyREnd: a code for modelling the transport of radionuclides on geological time-scales. *Advances in Geoscience* **58**, pp. 109–119 (2023)  
 Behrens, C., Bjorge, M., Renz, A. et al. Numerische Modelle in Sicherheitsuntersuchungen für die Endlagersuche: Möglichkeiten und Grenzen. *Grundwasser - Zeitschrift der Fachsektion Hydrogeologie* **29**, 17–30 (2024)  
 Hoyer, E.-M., Lujendijk, E., Müller, P. et al. Preliminary safety analyses in the high-level radioactive waste site selection procedure in Germany. *Advances in Geoscience* **56**, 67–75 (2021)  
 Lehmann, C., Bilke, L., Buchwald, J. et al., OpenWorkflow - Development of an open-source synthesis-platform for safety investigations in the site selection process. *Grundwasser - Zeitschrift der Fachsektion Hydrogeologie*, **29**, 31–47 (2024)  
 Schafmeister, M.T., Schäfer, T. Hydrogeologische Aspekte bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle. *Grundwasser - Zeitschrift der Fachsektion Hydrogeologie* **29**, 1–2 (2024)  
 StandAG: Standortauswahlgesetz vom 5. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), das zuletzt durch Artikel 8 des Gesetzes vom 22. März 2023 (BGBl. 2023 I Nr. 88) geändert worden ist.