

Dr. Stephanie Zeunert, Dr. Christoph Behrens, Dr. Marlene Gelleszun, Dr. Shorash Miro, Dr. Phillip Kreye / Bereich Standortauswahl

## Einführung

- Nach § 4 Abs. 5 EndlSiAnfV ist für die zu erwartenden Entwicklungen zu prüfen und darzustellen, dass im Bewertungszeitraum
  - Insgesamt höchstens** ein Anteil von  $10^{-4}$
  - Jährlich höchstens** ein Anteil von  $10^{-9}$
 sowohl der **Masse** als auch der **Anzahl** der Atome aller ursprünglich eingelagerten Radionuklide aus dem Bereich der wesentlichen Barriere ausgetragen wird.
- Hierbei sind auch radioaktive Zerfallsprodukte zu berücksichtigen.

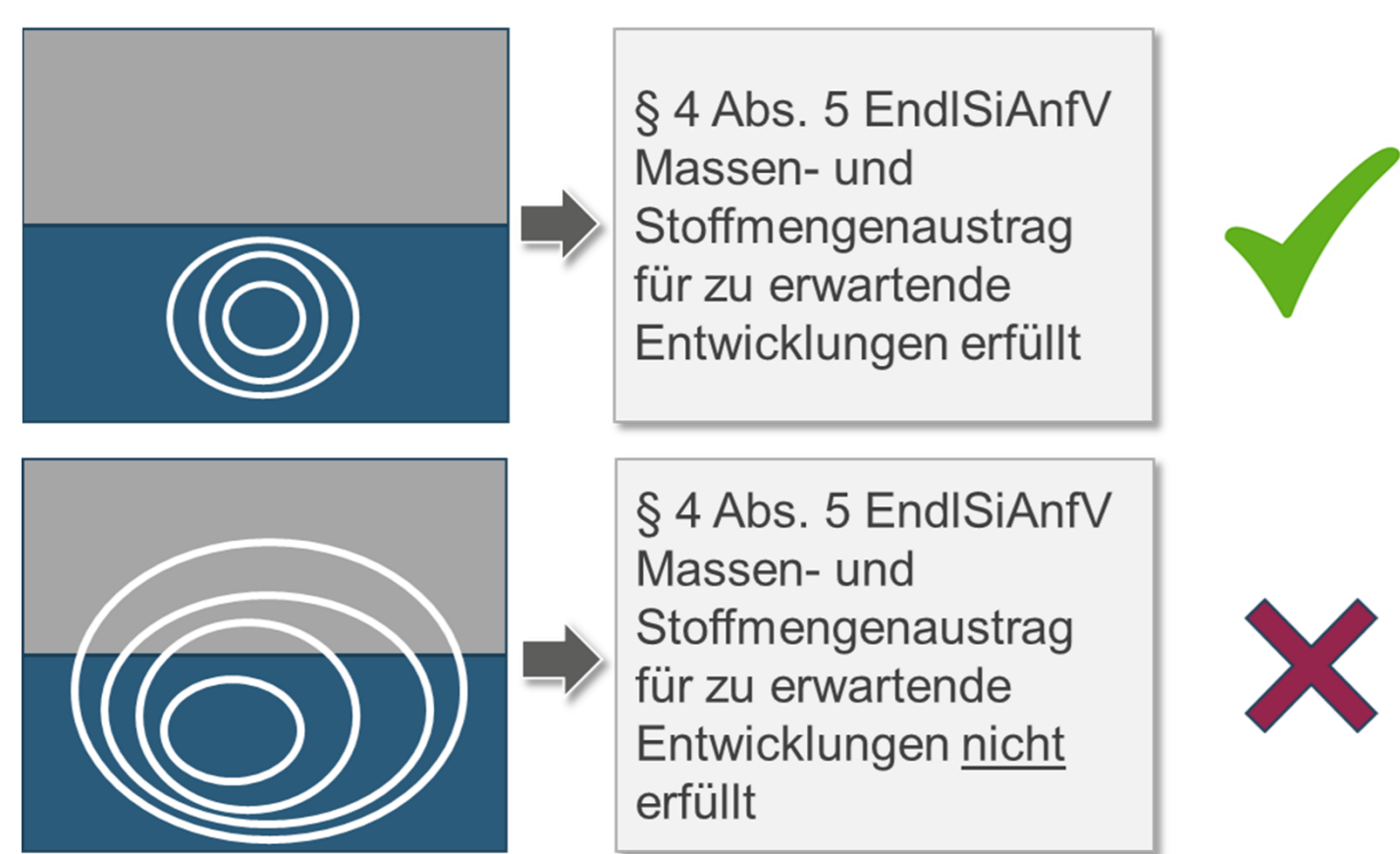


Abb. 1: Vereinfachte Illustration der Grenzwerte für den Massen- und Stoffmengenaustrag für zu erwartende Entwicklungen nach EndlSiAnfV. Quelle: BGE

### Vorgehen im Tongestein

Die Überprüfung der Einhaltung erfolgt im Tongestein durch eine numerische Modellierung des Radionuklidtransports im Bereich der geologischen Barriere mittels des 1D-Transportmodells **TransPyREnd** (Transportmodell in **Python** für Radionuklide aus einem **Endlager**).

## 1D-Code "TransPyREnd"

### Zugrundeliegende Transportgleichung

$$\phi R_i \frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{e,i} \frac{\partial c_i}{\partial x} - q c_i \right) + \sum_j \phi c_j R_j \lambda_{j,i} - \phi c_i R_i \lambda_i$$

Änderung der Konzentration

Diffusion, Advektion, Radioaktiver Zerfall

Retardationsfaktor  $\rightarrow$  Sorption (f(2:1 Tonminerale, Calcit))

Darcy-Geschwindigkeit

Gesamtzerfallsrate von Nuklid i

Diffusionskoeffizient (f(Temperatur, Porosität))

Zerfallsraten von Nuklid j zu i

- 1D-Transportmodell
- Diffusion, Advektion und Sorption
- Radioaktiver Zerfall (vereinfachtes Nuklidschema)
- Finite-Differenzen-Methode, Crank-Nicolson-Verfahren
- Implementierung in Python
- Open source (<https://www.openworkflow.de>)
- Methodik veröffentlicht in Behrens et al. 2023

## Methode zur quantitativen Bewertung des sicheren Einschusses

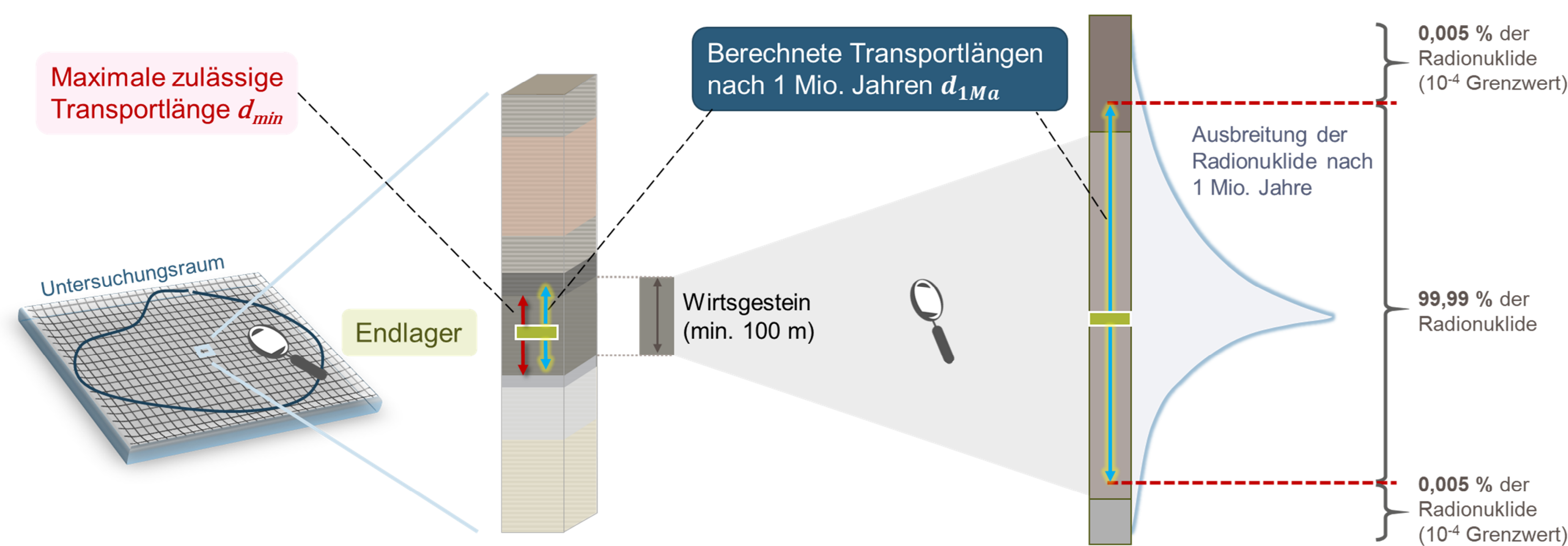


Abb. 2: Beispielhafte Darstellung der Berechnung der Transportlängen nach einer Million Jahre für ein ausgewähltes geologisches Profil. Quelle: BGE

### Bewertung der Sicherheit

- Überprüfung der gesetzlichen Anforderungen nach § 4 Abs. 5 EndlSiAnfV
  - Flächendifferenzierte Berechnung der Kennzahl  $I_M$
- $$I_M = d_{min} / d_{1Ma}$$
- Gesetzliche Anforderungen erfüllt? (ja, wenn  $I_M \geq 1$ )*

$d_{min}$  – Minimaler Abstand zwischen Endlager und Rand des Wirtsgesteins  
 $d_{1Ma}$  – Transportlänge: Distanz vom Endlager, in der die Grenzwerte eingehalten werden

## Überblick über die Herangehensweise

- Erstellung von 1D-Transportmodellen auf Basis der Geometrie geologischer Profile (abgeleitet aus geologischem 3D-Modell).
- Räumlich differenzierte Parametrisierung der 1D-Transportmodelle (lithologisch tiefendifferenziert, nuklidspezifisch).
- Transportsimulationen für jedes geologische Profil  $\rightarrow$  Berechnung der Transportlängen der Radionuklide nach einer Million Jahre  $\rightarrow$  Bewertung der Kennzahl  $I_M$ .
- Bei Erfüllung der regulatorischen Anforderungen ( $I_M \geq 1$ ):
  - Detailliertere Analyse an ausgewählten Profilen unter Berücksichtigung von Parameterunsicherheiten  $\rightarrow$  Ensemble-Rechnungen auf Grundlage von Parametervariationen  $\rightarrow$  Bewertung der Kennzahlen  $I_R$  und  $I_V$ .

### Bewertung der Robustheit

- Quantifizierung von Parameterunsicherheiten an ausgewählten Profilen in potenziellen Kategorie A-Gebieten
- Berechnung der Kennzahlen  $I_R$  und ggf.  $I_V$  (zur weiteren Differenzierung)

$$I_R = P(I_M \geq 1) \rightarrow \text{Anteil der Rechenläufe mit } I_M \geq 1$$

Falls  $I_R = 1$ :

$$I_V = 1 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{d_{1Ma_i}}{d_{min}} \right)^2 = 1 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{1}{I_{Mi}} \right)^2$$

$n$  – Anzahl der Rechenläufe

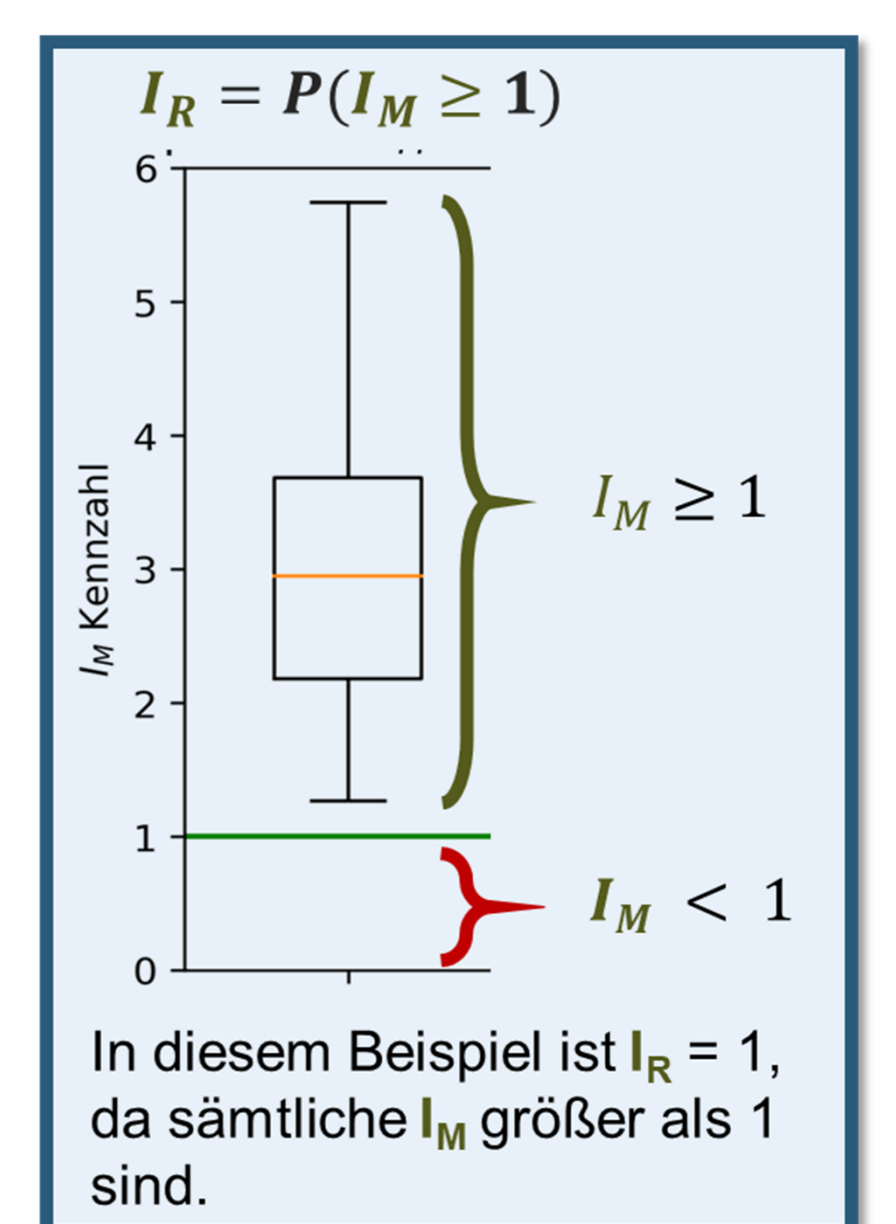


Abb. 3: Beispielhafte Berechnung der Kennzahl  $I_R$ . Quelle: BGE

## Benchmarking

- Prüfung von TransPyREnd gegen analytische Lösungen (Behrens et al. 2023), intern auch gegen weitere semianalytische und numerische Lösungen durchgeführt.
- Momentan Vergleich des Codes mit einem etablierten FEM-Code (OpenGeoSys).
- Verwendung von Continuous Integration (CI), um nach Änderungen des Codes oder der Umgebung automatisierte Tests durchzuführen.

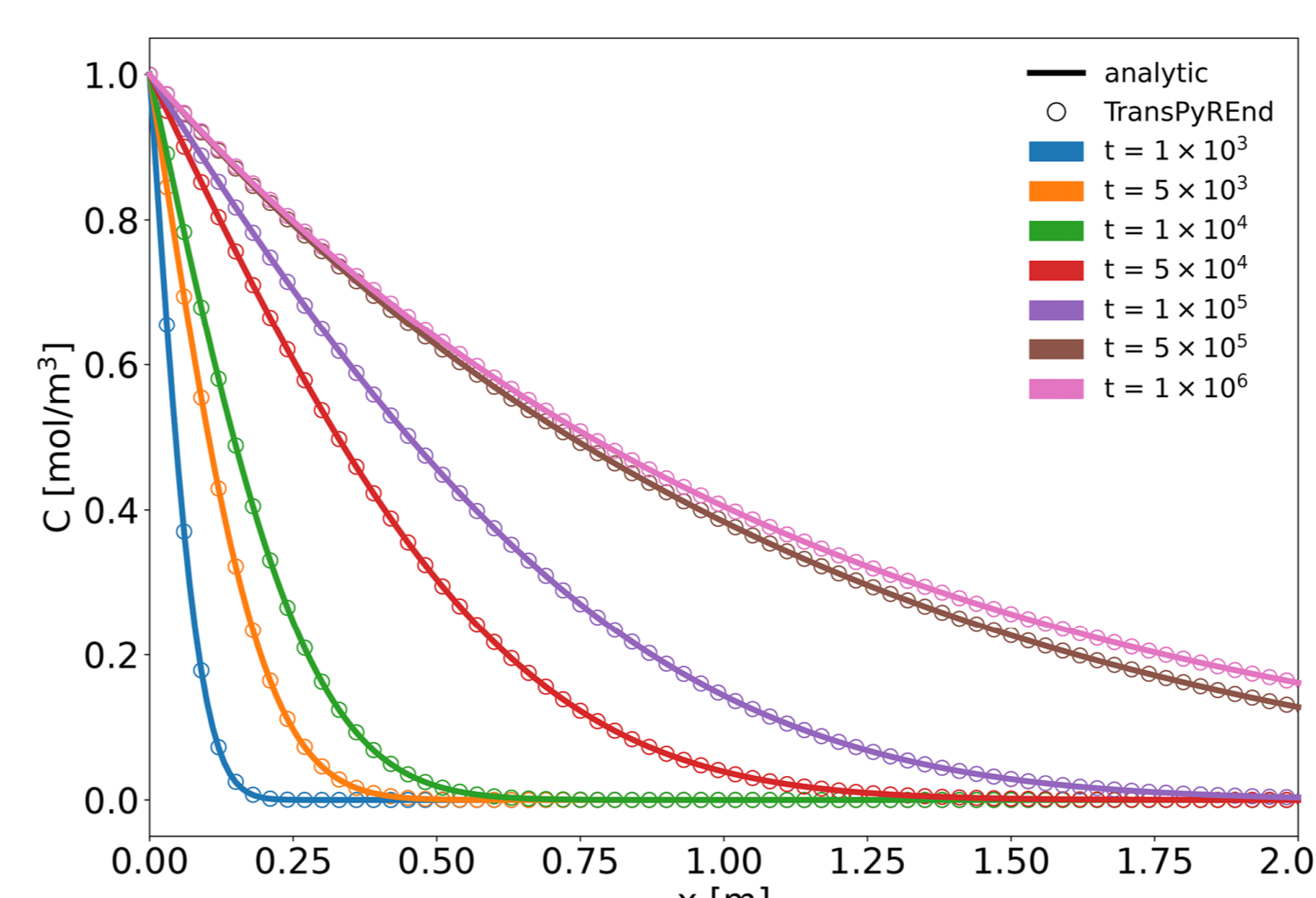


Abb. 4: Vergleich zwischen einer analytischen Lösung und TransPyREnd für ein Testproblem mit den Prozessen Diffusion, Sorption, Zerfall und Advektion. Quelle: Behrens et al. 2023

Literatur  
 Behrens, C.; Lujendijk, E.; Kreye, P.; Panitz, F.; Borge, M.; Gelleszun, M.; Renz, A.; Miro, S.; Rühak, W. (2023): TransPyREnd: a code for modelling the transport of radionuclides on geological timescales. Adv. Geosci., Bd. 58, S. 109–119. ISSN 1680-7359. DOI: <https://doi.org/10.5194/adgeo-58-109-2023>  
 EndlSiAnfV: Endlagersicherheitsanforderungsverordnung vom 6. Oktober 2020 (BGBl. I S. 2094)