

## Kopplung numerischer Modelle für C:HM- Transportprozesse

Ein Verbundprojekt von:



Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) mbH



## **Kopplung numerischer Modelle für C:HM- Transportprozesse**

Abschlussbericht des  
Verbundprojektes

J.-O. Delfs (ZAG)  
U. Görke (UFZ)  
H.-J. Herbert (GRS)  
E. Kalbus (ZAG)  
O. Kolditz (UFZ)  
K.-H. Lux (TUC)  
H. C. Moog (GRS)  
F. Werunsky (TUC)  
M. Xie (GRS)  
C. Zhang (GRS)

Mai 2010

### **Anmerkung:**

Die diesem Bericht zugrundeliegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) unter den Förderkennzeichen 02 C 1275, 02 C 1285 und 02 C 1295 gefördert.

Die Arbeiten wurden von der TU Clausthal, der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH und der Universität Tübingen/ZAG (UFZ) durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt allein bei den Autoren.

**Deskriptoren:**

Aufsättigung, Bentonit, Bohrloch, Bohrlochverschluss, CHEMAPP, C:HM-Prozess, Deponie, FLAC3D, Gekoppelte Prozesse, Geochemie, Geomechanik, GeoSys, HC-Prozess, Kriechen, Kristallisationsdruck, MISES3, Modellierung, Montmorillonit, Quelldruck, Quellung, Reaktiver Stofftransport, ROCKFLOW, Stoffmodell, Stoffmodell HOOKE, Stoffmodell LUBBY1, Ton, Triaxialzelle



# Inhaltsverzeichnis

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung.....</b>  | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Quelldrucke von reinem Montmorillonit: Experimente und Modellierung.....</b>                                 | <b>5</b>  |
| 2.1      | Theorie zum Kationenaustausch an Tonmineralen.....  | 7         |
| 2.2      | Entwicklung eines physikochemischen Modells für die Beschreibung des Quellens .....                             | 11        |
| 2.2.1    | HM-Prozess: Freies Quellen .....  | 11        |
| 2.2.2    | HM-Prozess: Volumen-konstantes Quellen .....  | 12        |
| 2.3      | Versuchsplanung .....   | 18        |
| 2.3.1    | Versuch 1 .....   | 18        |
| 2.3.2    | Versuch 2 .....   | 18        |
| 2.3.3    | Versuch 3 .....   | 18        |
| 2.4      | Probenvorbereitung.....   | 19        |
| 2.5      | Charakterisierung der Proben .....  | 19        |
| 2.6      | Versuchsbeschreibung.....   | 20        |
| 2.7      | Ergebnisse .....  | 22        |
| 2.7.1    | Versuch 1: Reine NaCl-Lösung.....   | 22        |
| 2.7.2    | Versuch 2: Ca-Na-Austausch.....   | 25        |
| 2.7.3    | Versuch 3: Na-Ca-Austausch und Ausfällung im Porenraum .....  | 26        |
| 2.8      | Diskussion und Zusammenfassung .....  | 26        |
| <b>3</b> | <b>Untersuchungen zur Mechanik von selbstverheilendem Versatz (SVV).....</b>                                    | <b>29</b> |
| 3.1      | Veranlassung .....  | 29        |
| 3.2      | Stand der Forschung.....  | 29        |
| 3.3      | Prüfkörperherstellung.....  | 31        |
| 3.3.1    | Vorüberlegungen über die zu erwartenden chemischen Reaktionen und die damit verbundenen Volumenänderungen ..... | 31        |
| 3.3.2    | Prüfkörperherstellung durch Aufsättigung.....   | 37        |
| 3.3.2.1  | Vorbemerkung.....   | 37        |

|          |  |            |
|----------|--|------------|
| 3.3.2.2  | Prüfkörperherstellung bei der GRS .....  | 38         |
| 3.3.2.3  | Erfahrungen aus der Prüfkörperherstellung mit den Titanzellen der<br>GRS und Schlussfolgerungen .....        | 40         |
| 3.3.2.4  | Prüfkörperherstellung an der TUC .....   | 42         |
| 3.3.3    | Prüfkörperherstellung durch Anmischen .....  | 49         |
| 3.3.3.1  | Vorüberlegungen.....   | 49         |
| 3.3.3.2  | Entwicklung einer Verfahrenstechnik zur Prüfkörperherstellung.....   | 49         |
| 3.4      | Kurzzeitversuche unter triaxialer Kompressionsbeanspruchung zur<br>Ermittlung der Festigkeitsparameter ..... | 54         |
| 3.4.1    | Versuchsaufbau und Versuchstechnik.....  | 54         |
| 3.4.2    | Versuchsauswertung.....  | 56         |
| 3.4.3    | Ergebnisse der Kurzzeitversuche .....  | 60         |
| 3.4.3.1  | Prüfkörper von der GRS und der TUC mit Herstellung durch<br>Aufsättigung .....                               | 60         |
| 3.4.3.2  | Prüfkörper der TUC mit Herstellung durch Anmischen .....   | 70         |
| 3.5      | Kompressionsversuche .....   | 72         |
| 3.6      | Kriechversuche .....   | 74         |
| 3.6.1    | Versuchsaufbau und Versuchstechnik.....  | 74         |
| 3.6.2    | Versuchsauswertung.....  | 77         |
| 3.6.3    | Ergebnisse .....   | 80         |
| 3.6.4    | Weiterführende Beobachtungen im Rahmen der Kriechversuche .....  | 85         |
| 3.7      | Permeationsmessungen .....   | 87         |
| 3.7.1    | Auswertung der Triaxialpermeameterversuche.....  | 87         |
| 3.7.2    | Röntgentomografieanalysen zum Gefügestand.....   | 95         |
| 3.8      | Diskussion und Zusammenfassung .....   | 99         |
| <b>4</b> | <b>Physikalische Modellierung von SVV (angemischt) .....</b>   | <b>103</b> |
| 4.1      | Mechanisches Modell für SVV .....  | 103        |
| 4.1.1    | Teilmodelle .....  | 103        |
| 4.1.2    | Das Stoffmodell Korthaus/Hein zur Beschreibung der zeitabhängigen<br>Kompaktion .....                        | 104        |
| 4.2      | Porositäts-Permeabilitätsmodell für SVV .....  | 107        |
| 4.3      | Diskussion und Zusammenfassung .....   | 111        |

|          |  |            |
|----------|--|------------|
| <b>5</b> | <b>Modellierung des Aufsättigungsprozesses von SVV .....</b>   | <b>113</b> |
| 5.1      | Entwicklung einer Schnittstelle zwischen MISES3 und EQLink<br>(ChemApp) und Implementierung dieses Programmpakets in<br>MISES3 .....                         | 114        |
| 5.1.1    | Grundsätzliche Informationen zu EQLink und ChemApp.....  | 114        |
| 5.1.2    | Implementierung von EQLink in MISES3 .....   | 115        |
| 5.1.3    | Simulation einer idealen homogenen Aufsättigung .....  | 120        |
| 5.1.4    | Simulation einer idealen inhomogenen Aufsättigung .....  | 122        |
| 5.1.5    | Chemisch-mechanisch gekoppelte Simulation mit der Software<br>MISES3 .....   | 128        |
| 5.1.6    | Fehlerdiagnose .....   | 131        |
| 5.2      | Überlegungen zur Definition eines Hydratisierungs- bzw.<br>Aushärtungsgrades .....   | 131        |
| 5.3      | Vorüberlegungen zu den Möglichkeiten einer C:HM-Kopplung mit<br>FLAC3D .....   | 134        |
| 5.3.1    | Mechanischer Ansatz.....   | 134        |
| 5.3.2    | Beurteilung der C:HM-Kopplung mit FLAC3D.....  | 141        |
| 5.4      | Detaillierte Betrachtung des Aufsättigungsprozesses im Hinblick auf<br>die Identifizierung der zentralen Parameter der Experimente und<br>Simulationen ..... | 142        |
| 5.5      | Vorüberlegungen zu den Möglichkeiten einer Kopplung EQLink-<br>GeoSys .....  | 143        |
| 5.6      | Implementierung des Stoffmodells und der Porositäts-Permeabilitäts-<br>Beziehung in MISES3 .....   | 145        |
| 5.7      | Diskussion und Zusammenfassung .....   | 146        |
| <b>6</b> | <b>Modellierung eines in-situ-Versuchs zur Aufsättigung eines<br/>vertikalen, mit SVV verfüllten Bohrlochs .....</b>   | <b>149</b> |
| 6.1      | Grundgedanken zu Bohrlochlagerung .....  | 149        |
| 6.2      | Grundlagen der Modellierung.....   | 150        |
| 6.2.1    | Ablaufschema der numerischen Berechnungen zur Simulation des<br>Bohrlochverschluss-Tragverhaltens.....   | 150        |
| 6.2.2    | Geometrisches Modell .....   | 152        |
| 6.2.3    | Physikalische Modelle und Materialparameter.....   | 154        |

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| 6.2.4    | Fallunterscheidung .....  | 154        |
| 6.2.4.1  | Trockener (wasserfreier) SVV – kein Lösungszutritt .....  | 156        |
| 6.2.4.2  | Angemischter SVV – kein Lösungszutritt .....  | 156        |
| 6.2.4.3  | Aufgesättigter SVV – kein Lösungszutritt .....  | 156        |
| 6.2.4.4  | Wasserfreier SVV – undefinierter Lösungszutritt .....   | 157        |
| 6.2.4.5  | Angemischter SVV – undefinierter Lösungszutritt .....   | 158        |
| 6.2.4.6  | Aufgesättigter SVV – undefinierter Lösungszutritt .....   | 159        |
| 6.3      | Simulationsablauf .....   | 159        |
| 6.4      | Auswertung der numerischen Simulationen .....   | 161        |
| 6.4.1    | Simulationsergebnisse bis zum Zeitpunkt der Anordnung des<br>Bohrlochverschlusses .....   | 161        |
| 6.4.2    | Vorbemerkungen zu den folgenden Auswertungen .....  | 167        |
| 6.4.3    | Salzgrus als Verschlussmaterial .....   | 170        |
| 6.4.4    | Angemischter SVV als Verschlussmaterial .....   | 182        |
| 6.4.5    | Aufgesättigter SVV als Verschlussmaterial ohne Kristallisationsdruck ...  | 186        |
| 6.4.6    | Aufgesättigter SVV als Verschlussmaterial mit Kristallisationsdruck .....   | 192        |
| 6.5      | Diskussion und Zusammenfassung .....  | 196        |
| <b>7</b> | <b>Experimentelle Ergebnisse zur Durchströmung eines axial<br/>gelochten und mit SVV verfüllten Bohrkerns mit NaCl-Lösung .....</b> | <b>203</b> |
| 7.1      | Einleitung .....  | 203        |
| 7.2      | Versuchsmaterialien .....   | 203        |
| 7.3      | Versuchsverfahren .....   | 206        |
| 7.4      | Datenauswertung .....   | 209        |
| 7.5      | Ergebnisse .....  | 210        |
| 7.5.1    | Versuch I .....   | 210        |
| 7.5.2    | Versuch II .....  | 214        |
| 7.5.3    | Versuch III .....   | 218        |
| 7.5.4    | Röntgendiffraktometrische Untersuchung .....  | 227        |
| 7.6      | Diskussion und Zusammenfassung .....  | 228        |
| <b>8</b> | <b>Simulation des Bohrkernversuchs .....</b>  | <b>231</b> |
| 8.1      | Modellbeschreibung .....  | 231        |

|           |   |            |
|-----------|---|------------|
| 8.1.1     | Berechnungen mit den Stoffmodellen Hooke und LUBBY2-Vergleich von Ergebnissen analytischer und numerischer Berechnungen mit Messwerten..... | 235        |
| 8.1.2     | Berechnungen mit dem Stoffmodell LUBBY1/LUBBY2.....   | 238        |
| 8.1.3     | Versuchsanalyse mit gleichzeitiger Betrachtung von Axial- und Radialverzerrungen.....   | 242        |
| 8.1.4     | Analyse mit Berücksichtigung der Kriechverzerrungen des Steinsalzes.....  | 252        |
| 8.2       | Diskussion und Zusammenfassung .....  | 255        |
| <b>9</b>  | <b>Weiterentwicklung des Programmsystems GeoSys.....</b>  | <b>259</b> |
| 9.1       | Einleitung .....  | 259        |
| 9.2       | Modellentwicklung.....  | 259        |
| 9.2.1     | HC-Prozess: Reaktiver Stofftransport in einem lösungserfüllten Porenraum .....  | 260        |
| 9.2.2     | Numerische Simulation unterschiedlicher Prozesse in HC-Prozess: Salz / SVV mit dem Programmsystem GeoSys/RockFlow.....                      | 262        |
| 9.2.3     | M-Prozess: Kriechen.....  | 263        |
| 9.2.4     | C:HM-Prozess: Modellierung des Zutritts gesättigter Salzlösung zu anfänglich trockenem SVV .....  | 271        |
| 9.3       | Softwareentwicklung .....   | 274        |
| 9.3.1     | Reaktiver Transport.....  | 274        |
| 9.3.2     | Parallelisierung.....   | 275        |
| 9.3.3     | Gekoppelte Prozesse.....  | 277        |
| 9.3.4     | Software- und Projektmanagement.....  | 278        |
| 9.4       | Benchmarking und Anwendungen .....  | 279        |
| 9.4.1     | Lösungs- und Fällungsreaktionen .....   | 279        |
| 9.4.2     | Festphasen-Lösungen .....   | 280        |
| <b>10</b> | <b>Zusammenfassung und Ausblick .....</b>   | <b>283</b> |
| <b>11</b> | <b>Anhang .....</b>   | <b>291</b> |
| 11.1      | Chemische Analysen der Triaxialpermeationsmessungen .....   | 291        |
| 11.2      | Ergänzungen zum mechanischen Modell für SVV .....   | 293        |

|        |   |            |
|--------|---|------------|
| 11.2.1 | Parameter zur Beschreibung des kurzfristigen Materialverhaltens<br>(Stoffmodelle Hooke und LUBBY1)..... | 293        |
| 11.2.2 | Parameter zur Beschreibung des langfristigen Materialverhaltens<br>(Stoffmodell LUBBY2).....            | 296        |
| 11.2.3 | Parameter zur Beschreibung der Bruchfestigkeit von SVV<br>(Stoffmodell HOU/LUX).....                    | 298        |
|        | <b>Literaturverzeichnis .....</b>   | <b>301</b> |
|        | <b>Abbildungsverzeichnis .....</b>  | <b>311</b> |
|        | <b>Tabellenverzeichnis .....</b>  | <b>321</b> |
|        | <b>Veröffentlichungen .....</b>   | <b>323</b> |

# 1      **Einleitung**

Beim Eindringen von wässriger Lösung in Verschlussbauwerke aus Salz oder Bentonit kommt es zu hydraulischen, mechanischen und chemischen Effekten, die in ihrer Gesamtheit den unerwünschten Zutritt von Wasser in eine Untertagedeponie für chemotoxische Abfälle beeinflussen.

Computerprogramme zur numerischen Simulation des hydraulisch-mechanischen Verhaltens von Verschlussbauwerken enthalten Stoffgesetze, die für das verwendete Material und die zu erwartenden Bedingungen aus experimentellen Untersuchungen abgeleitet werden müssen. Partiiell sind die hydraulisch-mechanischen (HM-) Effekte auf chemische Reaktionen zwischen eindringender Lösung und den das Verschlussbauwerk konstituierenden Stoffen (Salz oder Bentonit) zurückzuführen (C-Effekte). In der Regel können diese Reaktionen mithilfe der geochemischen Modellierung quantitativ beschrieben werden.

Moderne experimentelle Verfahren ermöglichen einen verbesserten Zugriff auf Daten für die geochemische Modellierung. Unterstützt durch den gleichzeitigen Fortschritt der Rechentechnik können gekoppelte Simulationen von HM- und C-Effekten („C:HM-Modellierung“) mit einem sinnvollen Modellierungs- und Zeitaufwand realisiert werden. Derartige Berechnungen stellen jedoch weiterhin besondere Anforderungen an Modelle, Verfahren und Algorithmen. Zu den Gründen zählen:

1. Die Komplexität der erforderlichen numerischen Verfahren unter besonderer Berücksichtigung von Aspekten der Stabilität und Genauigkeit,
2. die Ermittlung bisher nicht erfasster Parameter zur Beschreibung der Wechselwirkung zwischen chemischen und HM-Prozessen und
3. die vielschichtigen Anforderungen an Experimente zur Validierung der gekoppelten Simulationen.

Das hier dargestellte Verbundprojekt verfolgte das Ziel, Simulationssoftware für die Analyse des HM-Verhaltens von selbstverheilendem Versatz (SVV) und Bentonit mit Computerprogrammen bzw. Programmmodulen für thermodynamische Gleichge-

wichtsrechnungen zu koppeln und die Ergebnisse anhand von Laborversuchen zu testen. Die durchgeführten Versuche lassen sich in drei Hauptkategorien einteilen:

1. Quelldruckversuche mit einem quellfähigen Tonmineral,
2. Versuche mit SVV-Prüfkörpern (hier sollten Aufschlüsse über die chemische Zusammensetzung des ausreagierten Materials sowie dessen mechanische und hydraulische Eigenschaften gewonnen werden) und
3. Durchströmung eines axial gelochten und mit SVV verfüllten Bohrkerns als maßstäblich größte, im Labor realisierbare Annäherung an in-situ-Bedingungen.

Das Forschungsprojekt war ein gemeinsames Vorhaben der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, sowie der Universitäten Clausthal (TUC – Lehrstuhl für Geomechanik und Deponietechnik) und Tübingen (Zentrum für Angewandte Geowissenschaften – ZAG). Die nachgewiesene Expertise der Projektpartner liegt in den Bereichen Geochemie (GRS), Geomechanik (TUC) und Hydromechanik/Software-Engineering (ZAG).

Der GRS Braunschweig oblag die Durchführung der Laborversuche sowie die Bereitstellung von Parameterdateien für die geochemische Modellierung. Für Modellrechnungen mit GeoSys/RockFlow, anfänglich auch MISESIII und FLAC, wurden entsprechende Schnittstellen für thermodynamische Gleichgewichtsberechnungen mit CHEMAPP bereitgestellt.

Der Zuständigkeitsbereich der TUC war ursprünglich die numerische Untersuchung des Aufsättigungsprozesses von SVV mit gesättigter NaCl-Lösung auf der Basis von Messdaten, die während der Prüfkörperherstellung aufgezeichnet wurden. Aus diesen Messdaten sollte ein Hydratisierungsgrad abgeleitet werden, um eine Kopplung zwischen den HM Prozessen und den reaktiven Transportvorgängen zu realisieren. Diese Kopplungsansätze sollten anschließend anhand einfacher Laborversuche getestet werden. Auf dieser Grundlage war geplant, das weitere Materialverhalten von SVV nach dem Aushärtungsprozess numerisch zu prognostizieren. Zur Verifikation der Ergebnisse wurde ein umfangreiches Laborprogramm vorgeschlagen, mit dem die mechanischen und hydraulischen Eigenschaften von ausgehärteten SVV Prüfkörpern ermittelt und anschließend in ein mechanisches Modell überführt werden konnten.



Dem ZAG oblag, entsprechend der Vorhabenbeschreibung, die gekoppelte numerische Modellierung hydromechanischer (HM) und chemischer (C) Prozesse. Für die Simulation der HM gekoppelten Vorgänge wurde das als Quellcode verfügbare Programmsystem GeoSys/RockFlow eingesetzt. Der reaktive Mehrkomponententransport sollte im Rahmen externer Programmmodule behandelt und über geeignete Schnittstellen an GeoSys/RockFlow gekoppelt werden. Auf diese Weise ist eine (teil)partitionierte numerische Simulation komplexer C:HM-Prozesse realisierbar. Die Softwareprodukte waren durch Simulation realer Versuchsergebnisse der Projektpartner zu testen und zu verifizieren.

Durch den Wechsel des Leiters des Teilprojektes 02 C 1295, Prof. O. Kolditz, sowie eines Teils seiner Arbeitsgruppe von der Universität Tübingen an das Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ) Leipzig im Jahr 2007, wurde die Bearbeitung des Teilprojektes einschließlich der weiteren Softwareentwicklung in Leipzig fortgeführt. Dabei verblieb das Teilprojekt formal am ZAG der Universität Tübingen. Im Folgenden werden somit die Arbeiten und Ergebnisse der Arbeitsgruppe mit dem Kürzel ZAG(UFZ) gekennzeichnet.

In einer Projektbesprechung am 20.05.2008 wurde unter anderem vor dem Hintergrund des Wechsels der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Kolditz von Tübingen nach Leipzig und Änderungen in der Projektleitung des TUC-Teilvorhabens der Stand der einzelnen Teilprojekte diskutiert. Basierend auf den dabei vereinbarten Zieländerungen und Verschiebungen von Aufgaben

- übernahm die Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Kolditz (UFZ) die Modellierung/Simulation der SVV-Versuche und gab die Modellierung der Tonversuche an die GRS ab,
- konzentrierte sich die Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Lux (TUC) im Weiteren auf die Ermittlung von Stoffdaten von SVV sowie die Modellierung/Simulation der Bohrkernversuche und trat die Modellierung/Simulation der SVV-Versuche an ZAG(UFZ) ab,
- befasste sich die GRS in der verbleibenden Projektphase mit der Modellierung der Tonversuche unter Verwendung von RockFlow, gekoppelt mit PHREEQC oder GEMS. Die Weiterentwicklung der Kopplung zwischen CHEMAPP und RockFlow zu diesem Zweck entfiel damit.

Begründet durch den hohen Vernetzungsgrad der Forschungsarbeiten zwischen den einzelnen Projektpartnern wurde der vorliegende Abschlussbericht als gemeinsames Dokument verfasst. Einzelberichte würden der intensiven Zusammenarbeit der beteiligten Institutionen nicht gerecht, die sich insbesondere in einer engen Verknüpfung experimenteller und numerischer Arbeiten dokumentiert.

## **2            Quelldrucke von reinem Montmorillonit: Experimente und Modellierung**

Kompaktierter Bentonit oder Bentonit/Sand-Mischungen finden verbreitet Anwendung als Verfüllmaterial und Abdichtmaterial. Eine Anwendung wird auch im Zusammenhang mit der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle diskutiert. Bentonite zeichnen sich im Kontakt mit wässriger Lösung durch ein hohes Quellvermögen aus, wodurch der weitere Zutritt von Lösung verlangsamt bzw. unterbunden wird. Dies hat unmittelbar Einfluss auf die Korrosion der Einlagerungsbehälter und schließlich auch den Transport von Radionukliden mit der Lösung.

Bentonite können durch Austrocknung ihr Volumen auch wieder verringern. Quantitativ werden Quellung und Schrumpfung durch eine Reihe von Faktoren beeinflusst, die sich in zwei Kategorien einteilen lassen:

1. Faktoren, die mit der Art des enthaltenen Tonminerals und dessen Anteil am Bentonit zusammenhängen;
2. Faktoren, die mit der Art der Einbringung des Bentonits und allgemeinen Umgebungsbedingungen zusammenhängen. Hier sind u. a. zu nennen: Trockendichte, Anfangswassergehalt, ggf. Kompaktionsmethode, Mikrostruktur, thermische Bedingungen, Elektrolytkonzentration usw. [NOR 55], [SEE 62], [LOW 79], [LOW 87], [HUY 99].

Die Quellung des Bentonits ist in Lösungen niedriger Ionenstärke auf osmotische Effekte, im Falle hochsalinarer Lösungen auf die Einlagerung von Wassermolekülen in die Zwischenschichten von Tonmineralen zurückzuführen (innerkristallines Quellen, siehe auch Kap. 2.1). So kann gereinigtes, trockenes Na-Montmorillonit-Pulver sein Volumen im Kontakt mit reinem Wasser um bis zu 1400 bis 2000 Prozent vergrößern, für einen Ca-Montmorillonit werden 45 bis 145 Prozent berichtet [MIE 55]. Wird die Volumenvergrößerung begrenzt oder sogar verhindert, so resultiert eine entsprechende Verringerung des Makro- und Meso-Porenvolumens. Damit einhergehend baut sich ein Quelldruck auf, der mit Hilfe von Oedometern oder Triaxial-Zellen gemessen werden kann.

Die Ursache der Bentonit-Quellung war Gegenstand vieler umfangreicher Untersuchungen. In ihnen wurde versucht, eine fundamentale Beziehung zwischen dem makroskopisch beobachtbaren Quell-Potential und den auf molekularer Ebene wirksam werdenden Wechselwirkungen zwischen einzelnen Tonpartikel und Wasser herzustellen (siehe zum Beispiel [MIL 90], [LOW 92], [QUI 97], [IAT 03]). Die Herangehensweisen beruhten auf der negativen Überschussladung der Montmorillonit-Partikel, der Poisson-Boltzmann-Theorie (PB), der Theorie der diffusen Doppelschichten von Gouy-Chapman (DDL, siehe zum Beispiel [GOU 10], [CHA 13]), und der DLVO-Theorie (so benannt nach Derjaguin, Landau, Verwey und Overbeck, siehe [DER 41], [VER 48]). Ihnen allen ist jedoch gemeinsam, dass ihre Aussagekraft auf den mikroskopischen Bereich beschränkt ist und auf die Verwendung semiempirischer Beziehungen, abgeleitet aus experimentellen Daten unter Bedingungen des freien Quellens. Daher sind die Anwendungsmöglichkeiten dieser Theorie nur begrenzt. Sie lassen sich keinesfalls für die Beschreibung komplexer, gekoppelter Prozesse einsetzen. Nach wie vor fehlt eine Brücke, die mikroskopische Prozessbeschreibung und makroskopische Effekte miteinander verbindet.

Die klassische Modellierung des Quellverhaltens von Bentonit beruhte auf Oedometer-Versuchen und Terzaghis Konzept zum effektiven Stress, um Daten zum Belastungs-Spannungsverhalten quellfähiger Tone zu ermitteln (siehe zum Beispiel [MIT 93], [SRI 90]). Numerische Modelle zum THMC-Verhalten gerieten erst im Kontext mit Überlegungen zum Design von Endlagern für hochradioaktive Abfälle in tiefen geologischen Formationen ins Blickfeld des Interesses. Hierbei interessierte man sich für die Beschreibung gekoppelter Prozesse innerhalb des Barrierematerials (siehe zum Beispiel [BÖR 85], [BEN 02]). Als erstes traten Noorishad et al. [NOO 82] mit einem numerischen Modell in die Öffentlichkeit, in dem THMC-Prozesse gekoppelt behandelt wurden.

In diesem Bericht wird ein neues, auf Prinzipien der physikalischen Chemie beruhendes Modell für die Beschreibung des Quelldrucks in einem volumenbeschränkten, reinen, quellfähigen Tonmineral vorgestellt. Zur Überprüfung des Modells wurden Experimente mit aufgereinigtem Montmorillonit durchgeführt, welcher mit unterschiedlichen Lösungen perkoliert wurde.

## 2.1 Theorie zum Kationenaustausch an Tonmineralen

Tonminerale sind natürlich vorkommende Alumosilikate, die als Verwitterungsprodukte die Tonfraktion von Böden dominieren. Die Grundbausteine der Tonminerale sind  $[\text{SiO}_4]$ -Tetraeder und  $\{\text{M}(\text{O},\text{OH})_6\}$ -Oktaeder. Die Si-Tetraeder sind über gemeinsame Sauerstoffatome zu Schichten verknüpft, und zwar so, dass das freibleibende Sauerstoffatom stets in dieselbe Richtung weist. Über diese sind die Si-Tetraeder mit einer Al-Oktaederschicht verknüpft, in der die Oktaeder ihrerseits über gemeinsame Sauerstoffatome miteinander verbunden sind. Die aus je einer Tetraeder- und einer Oktaederschicht bestehenden Schichten bauen die Zweischichttonminerale (1:1-Schichtsilicate) auf. In den Dreischichttonmineralen ist an die Oktaederschicht eine weitere Tetraederschicht gebunden, deren (in hypothetisch ungebundener Form) freiliegende Spitzen den Spitzen der bereits gebundenen, ersten Tetraederschicht entgegen weisen (2:1-Schichtsilicate). Bei Vierschichttonmineralen handelt es sich um 2:1-Schichtsilicate mit einer parallel zur Basalfläche orientierten Hydroxidzwischenschicht, bestehend aus oktaedrischen Formationen der Zusammensetzung  $\text{M}(\text{OH})_6^{(6-z)-}$  (mit  $\text{M}^{z+} = \text{Al}^{3+}, \text{Fe}^{2+}$  oder  $\text{Mg}^{2+}$ ).

Die weitere Systematik der Tonminerale richtet sich neben der Anzahl miteinander verbundener Tetraeder- und Oktaederschichten nach Art und Ausmaß des isomorphen Ersatzes von Zentralionen innerhalb der Schichten. Dieser kann negativ oder positiv geladene Fehlstellen innerhalb des Gitterverbandes erzeugen.

Tonminerale mit einer negativen Überschussladung im Kristallgitter stellen den quellfähigen Anteil in Bentoniten dar. Von daher erklärt sich das hohe Interesse an der Tonmineralchemie im Zusammenhang mit der Forschung zu geotechnischen Verschlussbauwerken mit Bentonit.

Die negative Überschussladung wird stets durch Kationen ausgeglichen. Die Bindung von Kationen an ein Tonmineral wird häufig synonym mit dem Begriff der Sorption verwendet. Dies ist ein Irrtum, wie kurz erläutert werden soll.

Unter Adsorption versteht man allgemein die Bindung und damit einhergehend ggf. eine Anreicherung von Molekülen oder Atomen aus einer Flüssigkeits- oder Gasphase an einen Festkörper. Für eine gegebene Temperatur besteht im Gleichgewicht eine wohldefinierte Beziehung zwischen der Zahl der pro Flächeneinheit adsorbierten Teilchen und deren Vorkommen in der korrespondierenden Gegenphase. Erfolgt die

Adsorption aus der Gasphase, wird diese Beziehung zum Druck des Adsorptivs in der Gasphase, andernfalls zu dessen Konzentration in der Lösung hergestellt. Die analytische Form dieser Beziehung wird als {s} Adsorptionsisotherme} bezeichnet und hängt von den speziellen Eigenschaften des Adsorptionssystems ab.

Je nach Art und Stärke der Bindung zwischen Adsorbens und Adsorptiv spricht man von Chemisorption und Physisorption. Physisorption liegt vor, wenn bei der Bindung lediglich van der Waals'sche Kräfte wirksam sind. Von Chemisorption spricht man, wenn die Bindungsstärke mehr derjenigen von kovalenten Bindungen nahekkommt. Chemisorption liegt insbesondere dann vor, wenn die adsorbierten Teilchen durch die Adsorption teilweise oder ganz zerfallen.

Der Kationenaustausch kann als Sonderfall der Adsorption betrachtet werden. In Abgrenzung zur Adsorption kann zum Austausch allgemein gesagt werden [MOO 97]:

- Das Adsorptiv ist positiv oder negativ geladen und bindet an Regionen des Adsorbens, in diesem speziellen Fall „Austauscher“ genannt, die eine oder mehrere Ladungen umgekehrten Vorzeichens tragen. Somit geschieht die Bindung zwischen Austauscher und Ion primär durch elektrostatische Kräfte.
- Der Übergang eines Ions aus der sorbierten in die gelöste Form geht in der Regel mit einem ladungsäquivalenten Übergang eines Gegenions in die umgekehrte Richtung einher.

Aus Punkt 2 folgt, dass ein Austauschgleichgewicht stets das Ergebnis einer Konkurrenzreaktion mindestens zweier Ionen gleichen Ladungsvorzeichens ist. Hieraus wiederum folgt, dass die der Adsorptionsisotherme entsprechende Austauschisotherme nicht absolute Konzentrationen, sondern vielmehr Quotienten aus Konzentrationen als Maß für den Adsorptivgehalt in jeder der beiden Phasen enthält. In Abgrenzung zur Adsorption kann für den Austausch an dieser Stelle festgehalten werden, dass die An- oder Abreicherung eines Ions an einem Austauscher nie isoliert, sondern immer nur relativ zu mindestens einem anderen Ion gleichen Ladungsvorzeichens betrachtet werden kann.

Eine Austauschreaktion kann allgemein beschrieben werden als



Darin beschreiben A und B die ausgetauschten Kationen mit den Ladungszahlen  $z_A +$  und  $z_B +$ . Symbole mit Oberstrich beziehen sich in diesem Bericht stets auf Zustände und Prozesse in der Austauscherphase. Das sich ausbildende Austauschgleichgewicht wird beschrieben durch die thermodynamische Gleichgewichtskonstante  $K_{\text{ex}}$  :

$$K_{\text{ex}} = \frac{\bar{a}_A^{z_B} a_B^{z_A}}{\bar{a}_B^{z_A} a_A^{z_B}} \quad (2.2)$$

Darin sind  $a$  und  $\bar{a}$  die Aktivitäten in wässriger Phase und an der Austauscheroberfläche.

Eine Austauschisotherme beschreibt für jeweils einen Satz von Temperatur- und Ionenstärke den Zusammenhang zwischen dem Äquivalenzionenbruch eines austauschbaren Ions in der Austauscherphase (y-Wert) und demjenigen in der Gleichgewichtslösung (x-Wert). Umgekehrt ausgedrückt lässt sich bei Kenntnis der jeweils gültigen Austauschisotherme für eine gegebene Zusammensetzung der Lösung also ausrechnen, mit welchem Ladungsanteil das betrachtete Ion auf der Austauscheroberfläche (zu der im weiteren Sinne auch die Zwischenschichträume von quellbaren Tonmineralen gehören) gebunden ist. Der Äquivalenzionenbruch stellt einen auf die Ladung der betrachteten Ionenspezies bezogenen Molenbruch dar. Er ist definiert als

$$E_i = \frac{z_i c_i}{N} \quad , \quad \bar{E}_i = \frac{z_i \bar{c}_i}{Q} \quad (2.3)$$

Dabei bezeichnen  $c_i$  die Konzentration in [mol/L] der Spezies  $i$  der Lösung und  $\bar{c}_i$  die Konzentration in [mol/kg] am Austauscher,  $N$  die Normalität der Lösung und  $Q$  die Austauschkapazität des Austauschers in [mol/kg]. Für eine binäre Lösung (nur zwei Kationen) gilt

$$E_B = 1 - E_A \quad \text{bzw.} \quad \bar{E}_B = 1 - \bar{E}_A \quad (2.4)$$

Substituiert man Konzentrationen durch Äquivalenzionenbrüche, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
\frac{\bar{E}_A^{z_B}}{(1-\bar{E}_A)^{z_A}} &= K_{\text{ex}} \cdot \frac{z_B}{z_A} \cdot Q^{(z_A-z_B)} \cdot \frac{\bar{f}_B^{z_A}}{\bar{f}_A^{z_B}} \cdot \frac{f_A^{z_B}}{f_B^{z_A}} \cdot \frac{c_A^{z_B}}{c_B^{z_A}} \\
&= K_{\text{ex}} \cdot \left(\frac{Q}{N}\right)^{(z_A-z_B)} \cdot \frac{\bar{f}_B^{z_A}}{\bar{f}_A^{z_B}} \cdot \frac{f_A^{z_B}}{f_B^{z_A}} \cdot \frac{E_A^{z_B}}{(1-E_A)^{z_A}}
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Gleichung (2.5) beschreibt in allgemeingültiger Form einen binären Austausch. Um sie zur Berechnung von Austauschgleichgewichten tatsächlich nutzen zu können, müssen jedoch die Aktivitätskoeffizienten für beide Kationenspezies in der sorbierten Form als Funktion der Austauscherbelegung bekannt sein. Dies ist im Allgemeinen nicht der Fall. Die verschiedenen, in der (vor allem bodenkundlichen) Literatur zu findenden Modellansätze für den Kationenaustausch unterscheiden sich nun darin, welche Näherungen für die Aktivitäten sorbierter Kationen verwendet werden. Diese führen zu den, der thermodynamischen Gleichgewichtskonstanten analogen Selektivitätskoeffizienten.

Es soll an dieser Stelle nicht weiter auf die verschiedenen in der Literatur auffindbaren Selektivitätsmodelle eingegangen werden. Der interessierte Leser wird auf [SPO 81] verwiesen. Als Beispiel soll der, für den uni-bivalenten Austausch bewährte, Gapon-Formalismus für den Na/Ca-Austausch aufgeführt werden. Aktivitätskoeffizienten für Kationen an der Austauscheroberfläche werden in ihm angenähert als

$$\bar{a}_A \approx \bar{E}_A^{z_A} \tag{2.6}$$

Der Gapon-Selektivitätskoeffizient ist definiert als

$$K_G \equiv \frac{\bar{E}_{\text{Na}} \sqrt{a_{\text{Ca}}}}{\bar{E}_{\text{Ca}} a_{\text{Na}}} \tag{2.7}$$

Dieser Ausdruck lässt sich unter Beachtung von Gleichung (2.3) und mit

$$\gamma = \frac{f_{\text{Na}}^2}{f_{\text{Ca}}} \tag{2.8}$$

in eine neue hypothetische Beziehung zwischen der Lösungszusammensetzung  $E_{\text{Na}}$  und der Oberflächenbelegung  $\bar{E}_{\text{Na}}$  umformen [MOO 98]:



$$\bar{E}_{\text{Na}} = \frac{Y}{Y-1} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{Y-1}{Y}} \right) ; \quad Y = K_G^2 (2\mathcal{N}) \frac{E_{\text{Na}}^2}{1 - E_{\text{Na}}^2} \quad (2.9)$$

Bei gegebener Temperatur lassen sich mit dieser Gleichung Kationenaustauschgleichgewichte als Funktion der (binären) Lösungszusammensetzung und der Normalität berechnen. Ein ähnlicher Ausdruck ließe sich mit der Ionenstärke  $I$  statt der Normalität  $N$  ableiten. Gleichung (2.9) besagt, dass ein Versuch, bei dem der Kationenaustausch untersucht wird, sinnvollerweise bei konstanter Normalität (oder konstanter Ionenstärke) durchgeführt werden sollte, damit der Prozess durch einen einzelnen Selektivitätskoeffizienten dargestellt werden kann.

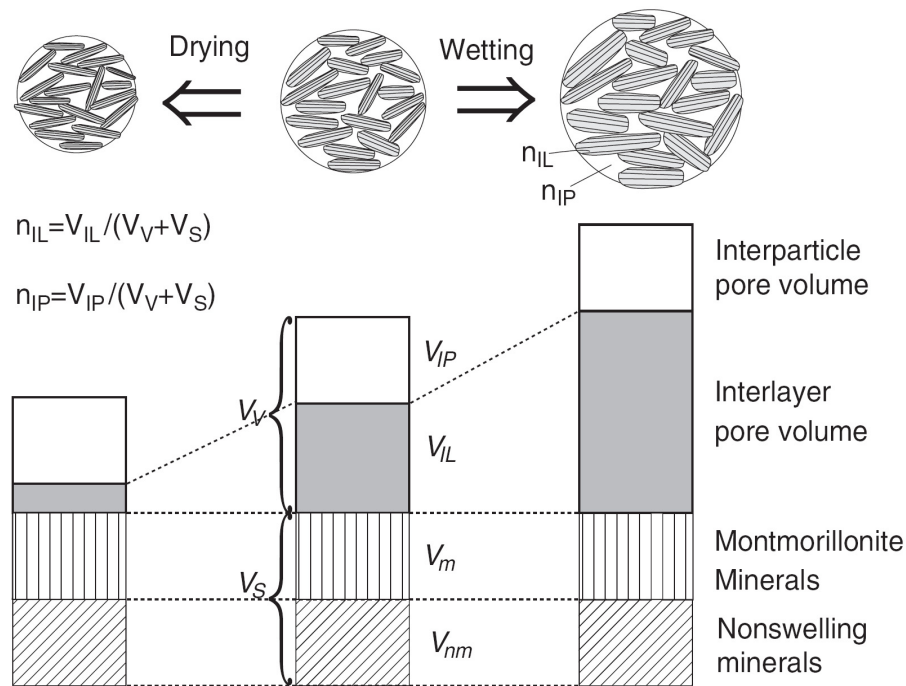
## 2.2 Entwicklung eines physikochemischen Modells für die Beschreibung des Quellens

### 2.2.1 HM-Prozess: Freies Quellen

Die Vorarbeiten zur Modellierung des unbehinderten Quellens von Bentonit wurde in der Arbeit von Xie et al. gelegt (siehe [XIE 04]). Für das mikroskopische Quellen, d. h. die Berechnung von Porositätsänderungen, wurde die double-diffusive-layer (DDL) Theorie zugrunde gelegt. Abb. 2.1 illustriert das Konzeptmodell für die Änderung der Interlayer-Porosität ( $n_{\text{IL}}$ ) bei Quell- und Schrumpfungprozesse während der Aufsättigung bzw. des Austrocknens von Bentoniten. Auf der Basis der DDL Theorie kann die maximale Interlayer-Porosität berechnet werden. Für die makroskopische Skalierung die Interlayer-Porosität wurde folgende Gleichung verwendet

$$n_{\text{IL}} = f(S^w) \cdot \beta \cdot n_{\text{IL,max}} \quad (2.10)$$

als funktionaler Zusammenhang zwischen Wassersättigung und Volumenanteil der expansiven Minerale.



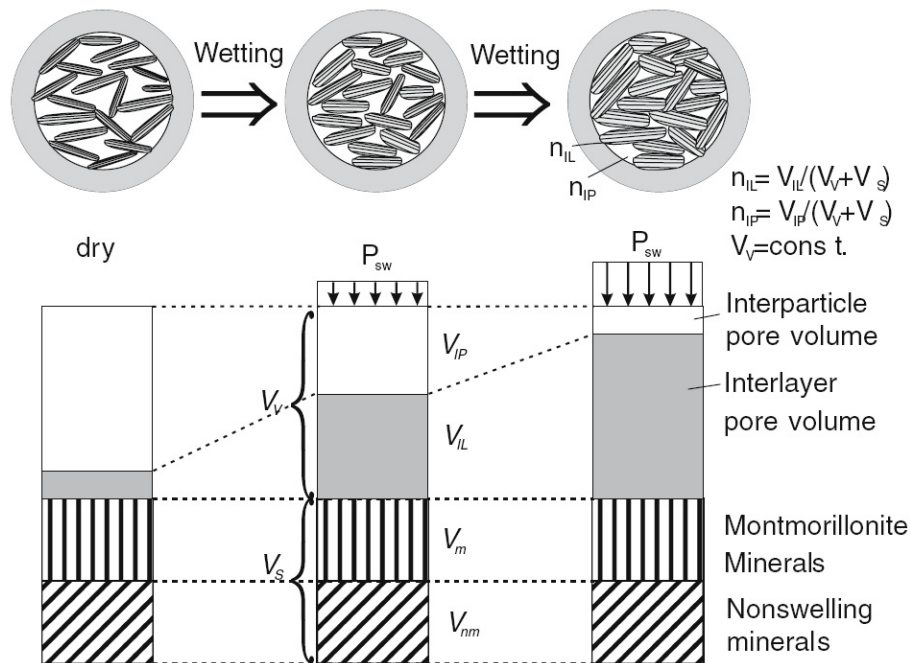
**Abb. 2.1** Konzeptmodell für Quell- und Schrumpfungsprozesse in expansiven Materialien, Änderung der Interlayer-Porosität

## 2.2.2 HM-Prozess: Volumen-konstantes Quellen

Basierend auf den Vorarbeiten zum freien Quellen (BMBF Vorhaben FZ 02C0881) wurden in diesem Vorhaben Modelle für die Berechnung von Quelldrücken unter Berücksichtigung des elastoplastischen Materialverhaltens von Bentoniten entwickelt (Abb. 2.2). Die Ergebnisse sind in der Arbeit von Xie et al. (2007) [XIE 07a] veröffentlicht. Im Gegensatz zum freien Quellen (Abb. 2.1) entsteht bei einer Behinderung der Volumenausdehnung der sogenannte Quelldruck. Die Kenntnis möglicher Quelldrücke ist entscheidend für die Verwendung von Bentoniten als Dichtungsmaterial. Das Quellen ist zur Abdichtung von Abfällen im Wirtsgestein zu einem gewissen Teil erwünscht. Zu hohe Quelldrücke können aber zur unerwünschten Schädigung der geologischen Barriere führen und damit die Dichtheit des Gesteins beeinträchtigen.

Das Simulationskonzept besteht aus zwei Schritten. Zunächst wird ein infinitesimaler freier Quellschritt berechnet. Anschließend werden Spannungsrandbedingungen berechnet und auf die Probe aufgebracht, um das ursprüngliche Volumen der Probe wieder herzustellen. Die dafür notwendigen Spannungen werden als Quelldruck interpretiert.

tiert. Mit dieser Methode war es erstmals möglich Quelldruckverteilungen zu bestimmen.



**Abb. 2.2** Konzeptmodell für behindertes Quellen (Quelldruck)

Wie im vorangegangenen Kapitel erläutert, bilden die Grundbausteine der Tonminerale schichtförmige Strukturen. Negative Fehlladungen werden durch Kationen ausgeglichen. Jeweils zwei Schichten können über so gebundene Kationen verbrückt werden. So entstehen elektronenmikroskopisch wahrnehmbare Stapel, wobei die verbrückenden Kationen dann als Zwischenschichtkationen angesprochen werden.

Wie viele individuelle Tonmineralschichten im Mittel einen Stapel aufbauen, hängt davon, mit welchen Kationen die Zwischenschicht besetzt ist bzw. von der Zusammensetzung der Lösung. So beobachteten Katti und Shanmugasundaram (2001) den Zerfall von Tonagglomeraten in kleinere Partikel während der Aufsättigung mittels digitaler Analyse von Bildern, die durch energie-dispersive Röntgenanalyse gewonnen wurden [KAT 01]. Herbert und Moog zeigten die Variation des Zwischenschichtabstandes durch veränderte Lösungszusammensetzungen auf [HER 02].

Gemäß dem Modell für das freie Quellen, basierend auf der DDL-Theorie, kann die Gesamtporosität  $n$  eines Bentonits eingeteilt werden in eine Zwischenschichtporosität

$n_{IL}$  (Porosität innerhalb der Partikel) und einer Inter-Partikel-Porosität  $n_{IP}$  (Porosität zwischen den Partikeln) [XIE 04].

$$n = n_{IP} + n_{IL} \quad (2.11)$$

Gemäß dieser Definition repräsentiert  $n_{IP}$  die Grob-Poren und kann als die Anfangsporosität einer trockenen Probe angesehen werden. Sofern die Quellung volumenkonstant erfolgt, bleibt auch die Gesamtporosität konstant. Die Zwischenschicht-Porosität nimmt jedoch im Zuge der Aufsättigung zu. Folglich muss die Inter-Partikel-Porosität dementsprechend abnehmen. An den Außenflächen des Partikels und im Zwischenschichtraum können sich diffuse Doppelschichten nur im Falle freien Quellens vollständig aufbauen. Die maximale Zwischenschichtporosität für ein Partikel bestehend aus effektiv  $m$  Schichten kann berechnet werden wie folgt [XIE 04]:

$$n_{IL\max} = m S_0 \rho_d \left( \frac{\epsilon \epsilon_0 R T}{2 F^2 I} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.12)$$

mit  $F$  = Faraday-Konstante ( $= 96485.309 \text{ C mol}^{-1}$ ),  $\epsilon$  = Dielektrizitätskonstante reinen Wassers,  $\epsilon_0$  = Dielektrizitätskonstante von Vakuum ( $= 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ C V}^{-1} \text{ m}^{-1}$ ),  $R$  = allgemeine Gaskonstante ( $= 8.314510 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ).

Somit verhält sich die maximale Zwischenschichtporosität invers proportional zur Ionenstärke  $I$  (siehe auch [STU 96]):

$$I = \frac{1}{2} \sum_i c_i z_i^2 \quad (2.13)$$

mit  $c_i$  = Konzentration ( $\text{mol l}^{-1}$ ) und  $z_i$  = Ladungszahl des  $i$ -ten Ions in Lösung.

Berücksichtigt man die bekannte Tatsache, dass der Quelldruck mit der Sättigung steigt, und dass die Höhe des Quellungspotentials vom Anteil des quellfähigen Materials im Bentonit abhängt, so kann die Zwischenschichtporosität  $n_{IL}$  berechnet werden mit

$$n_{IL} = (S^I)^\eta \cdot \beta \cdot n_{IL\max} \quad (2.14)$$

mit  $S_1$  = Aufsättigungsgrad,  $\beta$  = Volumenanteil des quellfähigen Materials und  $\eta$  = dimensionsloser Koeffizient.

Der Quelldruck von Bentoniten kann auf einer grundlegenden Ebene als eine Art interner Energie des quellfähigen Anteils betrachtet werden [XIE 07b]. Üblicherweise wird er unter volumenkonstanten Bedingungen gemessen, während Lösung in eine Bentonitprobe einströmt. Das Konzept eines Quellpotentials wurde erstmals von Seed et al. (1962) zur Darstellung der Quellfähigkeit von Bentoniten verwendet [SEE 62]. Bennethum und Weinstein [BEN 04] betrachteten dieses Konzept von einem thermodynamischen Standpunkt aus. In diesem Bericht wird das Quellpotential definiert als ein Potential zur Porositätsänderung  $n_{sw}$ . Im Fall der volumenkonstanten Quellung kann die Änderung des Zwischenschichtvolumens nicht vollständig in einen extern messbaren Quelldruck umgesetzt werden, da ein Teil durch eine entsprechende Verringerung des Inter-Partikel-Volumens „verloren“ geht, vor allem, in einer frühen Phase der Aufsättigung. Dieser Effekt wird umso ausgeprägter sein, je geringer die Einbautrockendichte des Materials ist. Theoretisch könnten die großen Poren zwischen den Partikeln durch diese Binnenquellung vollständig verschlossen werden. Praktisch wird eine gewisse Rest-Inter-Partikel-Porosität aber immer bestehen bleiben. Diese wird definiert als minimale Porosität  $n_{IP,min}$ . Der Zusammenhang zwischen  $n_{sw}$  und  $n_{IP,min}$  ist gegeben durch

$$n_{sw} = \Delta n_{IL} - (n_{IP,0} - n_{IP,min}) \quad (2.15)$$

und

$$n_{IP,0} = n_0 - n_{IL,0} \quad (2.16)$$

mit  $n_0$  = Gesamtporosität im Anfangszustand und  $n_{IL,0}$  = Zwischenschichtporosität im Anfangszustand. Die minimale Porosität ist umso niedriger, je höher der Quelldruck ist, und wird von der Kompressibilität des Materials beeinflusst:

$$n_{IP,min} = f(\sigma, I) \quad (2.17)$$

Zur Berechnung des in Laborexperimenten gemessenen Quelldrucks werden nun folgende Annahmen getroffen:

- Die Probe liegt zu Beginn des Versuches ungesättigt, am Ende des Versuches gesättigt vor.
- Die Probe ist homogen und isotrop.
- Alle chemischen Reaktionen – dies schließt den Kationenaustausch ein – befinden sich im Gleichgewicht.
- Die effektive Anzahl  $m$  an quellfähigen Schichten für jedes Partikel ist abhängig von der Ionenstärke der Porenlösung:

$$m = f_1(I) \quad (2.18)$$

- Der Wert für die minimale Inter-Partikel-Porosität  $n_{IP,min}$  hängt vom Quelldruck ab. Zur Berücksichtigung des Einflusses chemischer Prozesse auf den Quelldruck, wird angenommen, dass dieser Wert von der Ionenstärke der Porenlösung abhängt:

$$n_{IP,min} = f_2(I) \quad (2.19)$$

Je höher die Konzentration, desto niedriger ist der Quelldruck und somit desto höher ist der Wert für die minimale Inter-Partikel-Porosität.

Die Quellspannung  $\varepsilon_{sw}$  entspricht einer volumetrischen Spannung und ist gleich dem Quellpotential. Der Quelldruck  $\rho_{sw}$  entspricht einer volumetrischen Beanspruchung, die aus der Quellspannung berechnet werden kann ([IGS 98]):

$$P_{sw} = K' \varepsilon_{sw} = K' \eta_{sw} \quad (2.20)$$

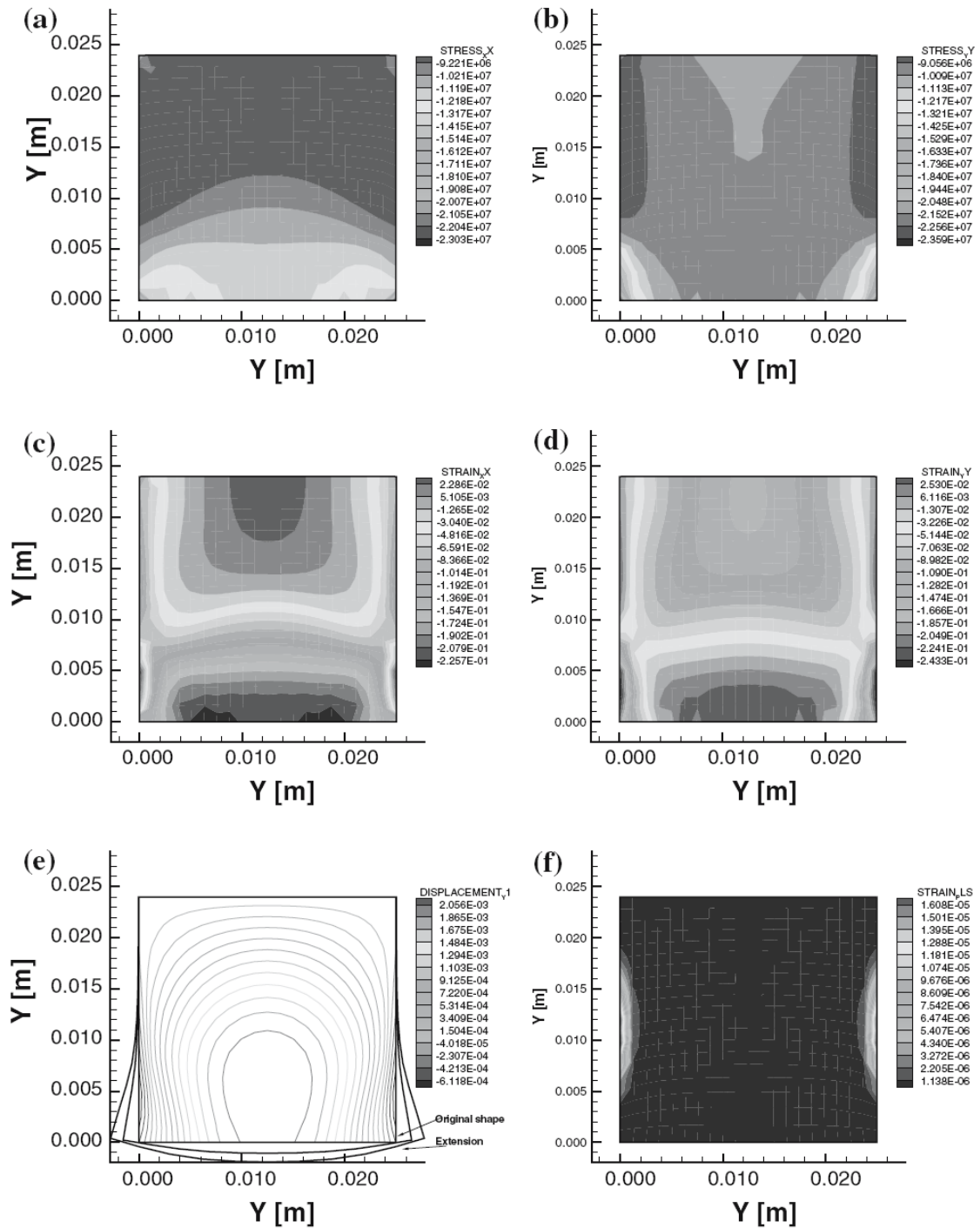
mit  $K' =$  volumetrisches Modul, das gemäß [IGS 98] ebenfalls berechnet werden kann:

$$K' = \frac{E}{3 - 6\nu} \quad (2.21)$$

mit  $E =$  elastisches Modul und  $\nu =$  Poisson Verhältnis.

Die Abb. 2.3 zeigt die Ergebnisse einer Demonstrationsrechnung, die nicht auf experimentellen Daten beruht (generisches Modell). Die dargestellten Zustände entsprechen

Quelldrucken nach ca. einer Woche Aufsättigung der Probe. Eine wichtige Voraussetzung für dieses Quelldruckmodell war die Entwicklung des elastoplastischen Deformationsmodells im Rahmen des BMBF-Vorhabens 02C1114 [WAN 06].



**Abb. 2.3** Ergebnisse der Quelldruckberechnungen, Spannungsverteilungen, plastische Verzerrung und Verschiebungen

## **2.3        Versuchsplanung**

Ausschlaggebend für die Planung der Versuche war das Bestreben, das untersuchte System möglichst einfach zu halten und den Quelldruck nach Möglichkeit auf einzelne Einflussfaktoren zurückführen zu können. Es ergaben sich drei unterschiedliche Versuche.

### **2.3.1        Versuch 1**

Ein Na-belegter Ton wird mit einer reinen NaCl-Lösung variabler Konzentration durchströmt. In diesem Fall wird die Zwischenschichtbelegung des Tones nicht geändert. Beobachtete Quelldruckunterschiede sind somit nur eine Folge der unterschiedlichen Ionenstärken in der Lösung. NaCl-Lösung wird in vier Konzentrationsstufen durch jeweils dieselbe Probe gepumpt: 0,001 M – 0,01 M – 0,1 M – 1,0 M.

### **2.3.2        Versuch 2**

Ein Ca-belegter Ton wird zunächst mit einer 0,05M CaCl<sub>2</sub>-Lösung äquilibriert. Danach wird durch dieselbe Probe eine 0,1 M NaCl-Lösung gepumpt. Die Normalität der Lösung bleibt somit während des gesamten Versuches konstant. Quelldruckunterschiede sind somit nur eine Folge der sich ändernden Belegung des Austauschers. Im Endzustand sollte zudem der Quelldruck jenem mit der entsprechenden Lösung in Versuch 1 entsprechen.

### **2.3.3        Versuch 3**

Ein Ca-belegter Ton wird mit 0,05 M CaCl<sub>2</sub>-Lösung äquilibriert. Danach wird dieselbe Probe mit einer 0,05 M Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-Lösung durchströmt. Wiederum werden isonormale Verhältnisse eingehalten. Durch den Einstrom von Sulfat wird im Porenraum die Ausfällung von Gips initiiert. Somit ist der sich ändernde Quelldruck eine Folge von zwei simultan wirkenden Prozessen: des Kationenaustausches (Änderung der Oberflächenbelegung) und der Ausfällung von Kristallen im Porenraum.



## 2.4 Probenvorbereitung

Um die Modellierung zu vereinfachen, wurde entschieden, nicht einen Bentonit zu untersuchen. Im Falle des MX-80 befinden sich neben dem quellfähigen Anteil eine Reihe anderer Begleitminerale im Bentonit. Durch Sedimentation von MX-80 in NaCl-Lösung wurde die  $<2\mu\text{m}$ -Fraktion isoliert, die vornehmlich aus dem quellfähigen Tonmineral Montmorillonit besteht. Ferner erfolgt eine Belegung mit Natrium-Kationen, indem mehrfach mit NaCl-Lösung äquilibriert wurde. Für Versuch 2 und 3 (s. u.) erfolgte eine Belegung mit Ca.

Zusätzlich zu der ursprünglichen Planung erfolgte dieser Arbeitsschritt zweimal im Verlaufe des Projektes. In der GRS wurde das Material nach der Belegung mit Na thermisch getrocknet ( $105\text{ }^{\circ}\text{C}$ , „OD“). An der Uni Greifswald wurde für diesen Schritt eine Gefriertrocknung durchgeführt („FD“). Damit sollten zwei Chargen Montmorillonit, die auf zwei unterschiedlichen Verfahrenswegen aus dem MX-80 abgetrennt wurden, verglichen werden. Wie sich später zeigte, unterschied sich das Quellverhalten beider Chargen signifikant.

## 2.5 Charakterisierung der Proben

Für die Versuche standen insgesamt drei Chargen an Tonen zu Verfügung. Diese wurden hinsichtlich ihrer Oberflächenbelegung untersucht. Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst.

**Tab. 2.1** Oberflächenbelegung der für die Quelldruckversuche eingesetzten Tone

| Probenname | Na    | K   | Mg  | Ca    | Sr  | Ba   | Summe | %  | KAK |
|------------|-------|-----|-----|-------|-----|------|-------|----|-----|
| OD-Na      | 210,3 | 0   | 3   | 13,7  | 0,3 | 0,03 | 227   | 93 | 68  |
| FD-Na      | 48,8  | 1,7 | 6,5 | 28,4  | 0,6 | 0,05 | 86    |    | 77  |
| OD-Ca      | 1,9   | 0   | 1,7 | 218,6 | 1,2 | 0,01 | 223   | 98 | 67  |

OD = thermisch getrocknet (GRS), FD = gefriergetrocknet (Uni Greifswald),  
KAK = Kationenaustausch-Kapazität; Angaben in meq/100 g

Trotz sorgfältiger Vorbehandlung waren die Proben nicht absolut homoionisch. Bei den thermisch getrockneten Tonen fällt auf, dass der Restsalzgehalt, die Differenz zwischen der Ladungssumme vorhandener Kationen und der KAK, wesentlich höher liegt. Dies zeigt, wie richtig es war, den Proben Monate Zeit zu geben, um sich mit einer

perkolierenden Lösungen ins Gleichgewicht zu setzen. Dies führte mit Sicherheit zu sinkenden Restsalzgehalten und einer homoionischeren Belegung.



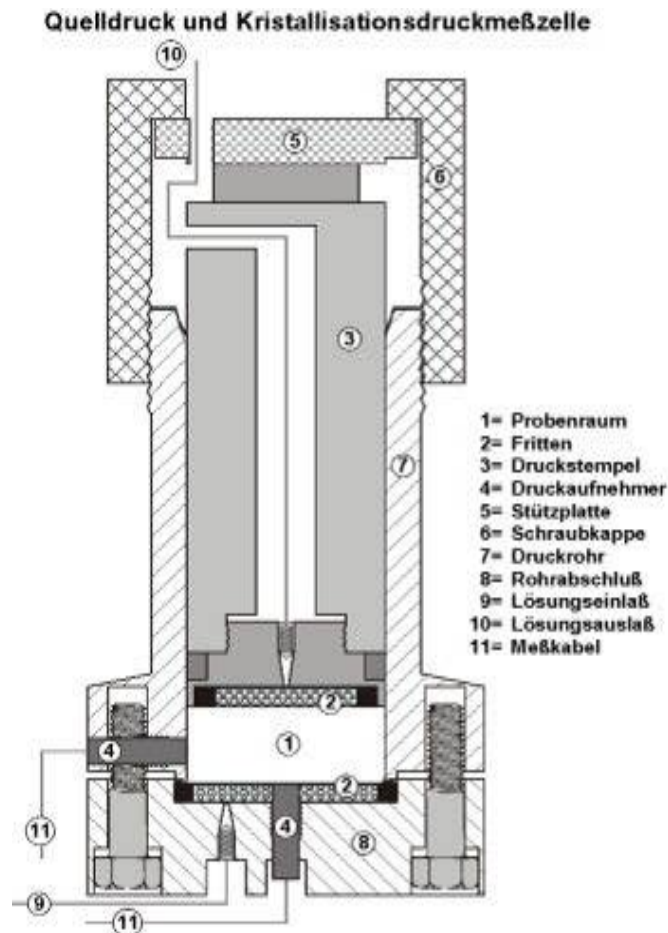
**Abb. 2.4** Na-belegter Ton, jeweils gleiche Einwaage: Links thermisch getrocknet (OD), rechts gefriergetrocknet (FD)

Die beiden Chargen unterschieden sich auch hinsichtlich ihrer spezifischen Oberfläche. Dies ergab bereits eine visuelle Inspektion (Abb. 2.4). Diese Beobachtung ist konsistent mit den unterschiedlichen Messwerten für die KAK, die beim gefriergetrockneten Ton höher lag. Eine höhere KAK, die in diesem Fall in Form von leicht austauschbaren Na-Ionen vorhanden ist, deutet auf ein höheres Quellvermögen hin, das so in der Tat später auch vorgefunden wurde.

## 2.6 Versuchsbeschreibung

75 g Ton wurden auf eine Dichte von  $1,6 \text{ g/cm}^3$  verdichtet. Die Verdichtung fand, ebenso wie die nachfolgende Durchströmung mit Lösung in einer Messzelle statt, die in der folgenden Abb. 2.5 dargestellt ist. Abhängig von der Gaspermeabilität der Fritten war hierzu eine Kraft zwischen 10 und 30 kN erforderlich. Dadurch stellte sich ein Anfangsdruck von bis zu 107 bar ein.

Danach wurde begonnen, die erste Lösung mittels einer HPLC-Pumpe in die Probe zu befördern. Um in der Anfangsphase eine möglichst große Lösungsmasse durch den Tonkörper zu pressen, wurde die maximale Pumpgeschwindigkeit von 10 ml/min gewählt. Innerhalb von 5 Stunden verfestigte sich der Ton so sehr, dass die Durchflussmenge bei Maximalpumpendruck von 250 bar auf ein Minimum sank.



**Abb. 2.5** Quelldruckmesszelle

Die Perkolation wurde anschließend unter Aufrechterhaltung des Maximaldruckes fortgesetzt. In Abständen von Wochen bis Monaten wurde die auslaufende Lösung beprobt und die Dichte gemessen. Die zutretende Lösung wurde regelmäßig ausgetauscht, um die über solch lange Zeiträume fast unvermeidlichen Verdunstungsverluste auszugleichen. Wenn die Dichte jener der zutretenden Lösung nahe kam, wurde die Zusammensetzung der Lösung per ICP/OES bestimmt. Die erreichbaren Flüsse waren außerordentlich gering. Naturgemäß konnte selbst bei über einjähriger Wartezeit kein vollständiger Austausch der Porenlösung durch die zutretenden Lösung erreicht, sondern nur näherungsweise erreicht werden.

Folgende Daten wurden mit Hilfe einer automatischen Messdatenerfassung erfasst:

- Förderrate
- Gesamtdruck = Fluiddruck + Quelldruck
- Masse an eingepresster Lösung

Wenn die Zusammensetzung der austretenden Lösung jener der zutretenden Lösung näherungsweise entsprach, wurde die HPLC-Pumpe abgeschaltet und die Ventile auf beiden Seiten der Messzelle geöffnet. Die Masse an austretender Lösung wurde durch Wägung bestimmt. Es dauerte im Allgemeinen etwa zwei Tage, bis sich ein konstanter Druck eingestellt hatte. Es war zu beachten, dass dieser aufgrund leicht schwankender Raumtemperaturen einen Tages- und Nachtgang aufwies, weswegen jeweils der Mittelwert berechnet wurde.

Anschließend wurde die zutretende Lösung gewechselt, also mit derselben Probe weitergearbeitet. Aufgrund der sich einstellenden niedrigen Fließraten dauerten einzelne Versuchsschritte Monate bis über ein Jahr. Einzelne Proben verweilten so über zwei oder mehr Jahre in der Messzelle. Es kam vor, dass über diesen langen Versuchszeitraum der seitliche Drucksensor irgendwann versagte. Da die Messdaten des seitlichen Sensors auch aus anderen Gründen nicht vertrauenswürdig erschienen, sehen wir im Rahmen dieses Berichtes von einer Dokumentation der „radialen Quelldrucke“ ab.

## **2.7 Ergebnisse**

### **2.7.1 Versuch 1: Reine NaCl-Lösung**

In der nachstehenden Tab. 2.2 wurden die Ergebnisse mit reiner NaCl-Lösung zusammengefasst. Zunächst ist festzustellen, dass mit dem gefriergetrockneten Ton deutlich längere Warteperioden notwendig waren. Dieses Material hatte ein deutlich stärkeres Quellvermögen, wie auch an den deutlich höheren Quelldrucken in Abb. 2.6 erkennbar ist. Bei einem maximalen Pumpendruck von 250 bar ergaben sich niedrigere Flüsse, die dazu führten, dass die Porenlösung langsamer ausgetauscht wurde.

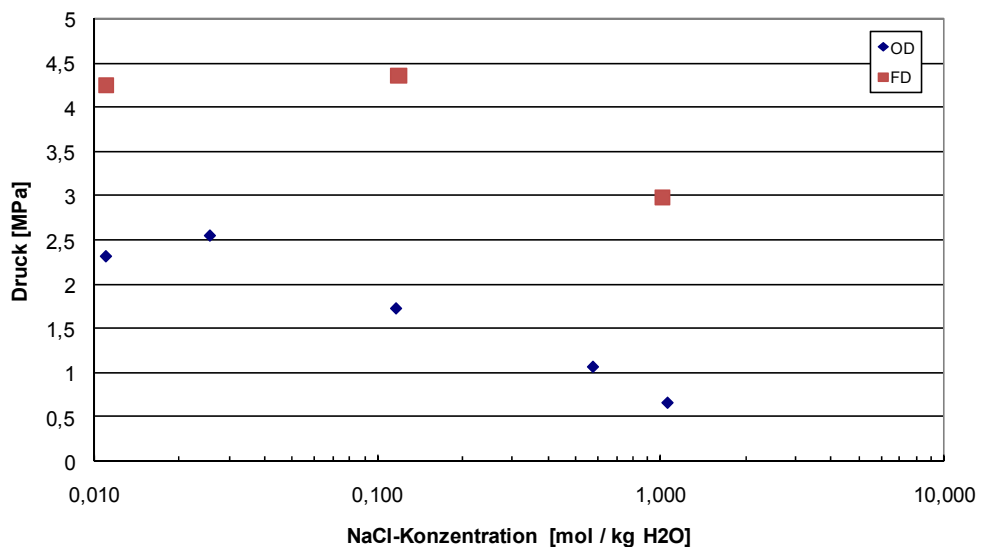
Der zweite überraschende Befund ist, dass der Quelldruck nicht monoton mit abnehmender Ionenstärke steigt. Im Falle des thermisch getrockneten Tones durchschreitet der Quelldruck bei ca. 0,02 mol/kg NaCl ein Maximum. Auch bei dem gefriergetrockne-

ten Ton sinkt der gemessene Quelldruck von 0,119 nach 0,011 mol/kg leicht ab. Die Gründe hierfür sind derzeit unklar. Ein nachträgliches Kriechen des Materials erscheint als alleinige Erklärung nicht plausibel, da in den beiden Versuchen mit den unterschiedlich getrockneten Tönen bewusst die Reihenfolge vertauscht wurde, mit der die einströmenden Lösungen gewechselt wurden.

**Tab. 2.2** Quelldrucke mit reiner NaCl-Lösung unterschiedlicher Konzentration

| Versuch | NaCl [mol / kg] | $P_{sw}$ | Beginn     | Ende       | Dauer      |
|---------|-----------------|----------|------------|------------|------------|
| OD-1    | 0,011           | 22,9     | 17.02.2004 | 16.07.2004 | 5 Monate   |
| OD-1    | 0,026           | 25,2     | 19.07.2004 | 11.01.2005 | 6 Monate   |
| OD-1    | 0,116           | 17,1     | 11.01.2005 | 22.06.2005 | 5 Monate   |
| OD*     | 0,575           | 10,6     | 31.10.2005 | 10.03.2006 | 4,5 Monate |
| OD-1    | 1,053           | 6,6      | 22.06.2005 | 24.10.2005 | 4 Monate   |
| FD-1    | 1,017           | 29,5     | 17.07.2006 | 18.09.2006 | 2 Monate   |
| FD-1    | 0,119           | 43,0     | 20.09.2006 | 24.05.2007 | 8 Monate   |
| FD-1    | 0,011           | 42       | 24.05.2007 | 23.07.2008 | 14 Monate  |
| FD-1    | 0,001           |          | 23.07.2008 |            | Läuft noch |

\* Datensatz aus einem später abgebrochenen Versuch, bei dem anfänglich mit 0,5 M NaCl-Lösung äquilibriert wurde.



**Abb. 2.6** Quelldrucke mit reiner NaCl-Lösung

Die für die Modellierung angesetzten Materialeigenschaften sind in der folgenden Tab. 2.3 zusammengestellt. Die äußere, spezifische Oberfläche ist mit 48 m<sup>2</sup>/g größer als jener in der Literatur ([XIE 07b]), was gewiss darauf zurückzuführen ist, dass mit dem

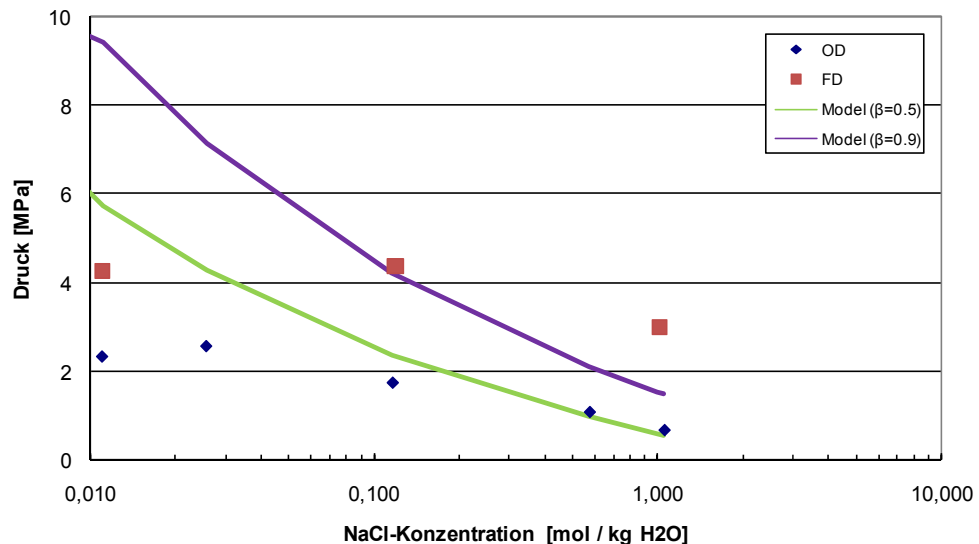
hier untersuchten Montmorillonit der feinkörnige Anteil des MX-80 vorlag. Die maximal effektive Anzahl von Schichten je Partikel wurde daher ebenfalls höher gesetzt als in unbehandeltem Bentonit.

**Tab. 2.3** Materialeigenschaften von MX-80 (nach [XIE 07b])

| Symbol       | Beschreibung                                | Wert           | Einheit                             |
|--------------|---|----------------|-------------------------------------|
| $\rho_D$     | Einbautrockendichte                         | 1600           | kg/m <sup>3</sup>                   |
| $n_0$        | Anfangsporosität                            | 0,37           | -                                   |
| $S_0$        | Äußere spezifische Oberfläche               | 48*            | m <sup>2</sup> /g                   |
| $\beta$      | Anteil quellfähigen Materials               | 0,5 oder 0,9*  | -                                   |
| $\eta$       | Koeffizient in Gleichung (2.14)             | 1,5            | -                                   |
| $m_0$        | Maximale effektive Schichtzahl pro Partikel | 44*            | -                                   |
| $S_{I,0}$    | Anfangssättigung                            | 0,357          | -                                   |
| $S_{I,sat}$  | Endsättigung                                | 1              | -                                   |
| $n_{IP,min}$ | Minimale Zwischenschichtporosität           | 0,03           | -                                   |
| $E$          | Young's Modul                               | 3,5            | MPa                                 |
| $\nu$        | Poisson Verhältnis                          | 0,3            | -                                   |
| $\epsilon_0$ | Dielektrizitätskonstante von Vakuum         | $8,8510^{-12}$ | C V <sup>-1</sup> m <sup>-1</sup>   |
| $\epsilon$   | Dielektrizitätskonstante von reinem Wasser  | 87,892         | C V <sup>-1</sup> m <sup>-1</sup>   |
| R            | Allgemeine Gaskonstante                     | 8,31451        | J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> |
| F            | Faraday Konstante                           | 96485,309      | C mol <sup>-1</sup>                 |

\* bei der Modellentwicklung optimierte Parameter

In der folgenden Abb. 2.7 werden berechnete und modellierte Quelldrucke gegenübergestellt. Obgleich mit der < 2µm-Fraktion eigentlich der quellfähige Anteil aus dem MX -80 abgetrennt wurde, scheint die nachfolgende thermische Trocknung das Material eines Teils seiner Quellfähigkeit beraubt zu haben. Die Quelldrucke für dieses Material können nur mit einem quellfähigen Anteil von  $\beta = 0,5$  dargestellt werden – und auch nur für relativ hohe Ionenstärken. Die Gefriertrocknung ließ ein Material zurück, dessen Quelldruck mit einem höheren quellfähigen Anteil von  $\beta = 0,9$  angenähert werden konnte. Was aber dennoch ins Auge fällt, ist, dass der Verlauf der Quelldruckdaten nicht wiedergegeben wird. Insbesondere bei niedrigen Ionenstärken sind die Abweichungen beträchtlich.



**Abb. 2.7** Vergleich von experimentell ermittelten mit modellierten Quelldruck

## 2.7.2 Versuch 2: Ca-Na-Austausch

Dieser Versuch wurde nur mit dem ofengetrockneten Material durchgeführt. Versuchsbeginn war der 27.02.2006, Versuchsende war 09.08.2007. Am 30.10.2006 wurde durch Dichtemessung eine weitgehende Äquilibrierung des Prüfkörpers mit 0,05 M  $\text{CaCl}_2$ -Lösung festgestellt entsprechend einer Ionenstärke von 0,15 M. Der gemessene Quelldruck betrug 36,5 bar. Dies ist deutlich mehr als bei einer vergleichbaren Ionenstärke mit reiner NaCl-Lösung gemessen wurde. Folglich ist es nicht die Ionenstärke als alleinige physikochemische Kenngröße, die den Quelldruck bestimmt, sondern es kommen ionenspezifische, mindestens aber ladungsspezifische Effekte hinzu, die derzeit modellhaft nicht beschrieben werden können.

Nach Äquilibrierung mit der  $\text{CaCl}_2$ -Lösung wurde am Zulauf auf eine 0,1 M NaCl-Lösung umgestellt. Am 03.07.2007 wurde durch Dichtebestimmung und anschließende Analyse eine weitgehende Gleichgewichtseinstellung festgestellt. Die Lösung enthielt 0,106 mol/kg Na und 0,00017 mol/kg Ca. Die sehr niedrige Ca-Konzentration ließ auf einen weitgehenden Rücktausch der Ca-Ionen gegen Na-Ionen schließen. Damit hätte der gemessene Quelldruck jenem bei entsprechender Ionenstärke in Versuch zumindest ähnlich müssen. Tatsächlich wurde aber ein Quelldruck von 25,4 bar gemessen. Zum Vergleich: In Versuch 1 wurde bei einer NaCl-Konzentration von 0,116 mol/kg ein Quelldruck von 17,1 bar gemessen.

Diese Abweichung kann derzeit nicht befriedigend erklärt werden. Mit diesem Ergebnis zeichnet sich aber ab, dass der Quelldruck nicht nur von der Trocknungsmethode, der Ionenstärke und der Lösungszusammensetzung abhängt, sondern auch vom Ionenbesatz, den das Material vor dem aktuellen Gleichgewichtsschritt innehatte. Letztlich ist auch dies ein Effekt, der durch kein Modell befriedigend erklärt werden kann.

### **2.7.3 Versuch 3: Na-Ca-Austausch und Ausfällung im Porenraum**

Dieser Versuch wurde am 15.07.2008 mit gefriergetrocknetem Ton begonnen. Seitdem wird eine 0,05 M  $\text{CaCl}_2$ -Lösung durch die Probe gepumpt. Ein Gleichgewicht konnte zum Zeitpunkt der Niederschrift dieses Berichtes nicht festgestellt werden. Der Versuch wird über den Projektzeitraum hinaus fortgeführt werden.

Nach erfolgter Voräquilibrierung wird eine 0,05 M  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ -Lösung durch die Probe gepumpt werden.

## **2.8 Diskussion und Zusammenfassung**

Die an der GRS entwickelte Methode zur Quelldruckmessung an kompaktierten Bentoniten wurde erfolgreich dafür eingesetzt, den Einfluss der chemischen Zusammensetzung der Lösung zu untersuchen. Mit dem sich im inneren Probenraum auf der Unterseite (der Injektionsseite) befindlichen Drucksensor konnte der sich im Zuge der sich ändernden Lösungszusammensetzung variierende lokale Druck präzise gemessen werden. Da jede Probe für eine ganze Serie von Versuchen eingesetzt wurde, wurden Probleme, die auf nicht reproduzierbare Faktoren bei der Probenherstellung zurückzuführen sind, weitestgehend vermieden.

Es wurde eine Reihe von Quelldruckversuchen durchgeführt, bei denen auf möglichst einfache Bedingungen geachtet wurde: Aufgereinigter, homoionisch belegter Montmorillonit wurde mit einfach zusammen gesetzten Lösung beaufschlagt, wobei für die Äquilibrierung reichlich Zeit gegeben wurde.

Der Befund, dass das Quellpotential von Bentonit mit zunehmender Ionenstärke abnimmt, wird durch viele Experimente im In- und Ausland immer wieder bestätigt. In solchen Versuchen wird jedoch zumeist entweder mit einer geringeren Einbautrockendichte gearbeitet oder es wird eine Volumenänderung der Probe zugelassen. Mit die-



ser Arbeit kann aber gezeigt werden, dass im Falle des volumenkonstanten Quellens nicht mit denselben Ansätzen, wie beim freien Quellen gearbeitet werden darf. Über ähnliche Ergebnisse wurde kürzlich in der Fachliteratur berichtet [SAT 09]. Wir führen dies darauf zurück, dass die komplexe Kopplung chemischer, hydraulischer und mechanischer Prozesse zu Effekten führen, die durch die derzeit bestehenden Modelle in ihrer Gesamtheit nicht beschrieben werden können. Die Auswirkungen dieser gekoppelten Prozesse sind offensichtlich umso gravierender, je niedriger die Ionenstärke der Porenlösung ist.

Betrachtet man die Ergebnisse im Vergleich zwischen dem gefriergetrockneten und dem thermisch getrockneten Material, so zeigt sich, dass eine Variation der chemischen Zusammensetzung der Lösung zwar zum selben Trend der Quelldruckänderung führt, im Falle des gefriergetrockneten Materials aber zu viel höheren Absolutwerten des Quelldrucks. Dies weist klar auf einen bisher in den verwendeten Modellen nicht berücksichtigten Einfluss der Makrostruktur des Bentonits hin. Das thermisch getrocknete Material lag in erkennbar größeren und härteren Aggregaten vor, die im Verlauf der Kompaktion zu Inhomogenitäten geführt und selbst weniger Wasser aufgenommen haben.

Die Modellierung des Quellungsprozesses wurde mit GeoSys/RockFlow durchgeführt, in welchem insgesamt drei Quellmodelle implementiert sind. Nur eines dieser Modelle bezog chemische Effekte in die Rechnung mit ein. Es wurde in früheren Rechenläufen erfolgreich für die Simulation von freien Quellungsprozessen angewendet [XIE 04]. Die Anwendung auf die in diesem Vorhaben durchgeführten Versuche demonstrierte, dass es für volumenkonstantes Quellen bei hohen Ionenstärken durchaus anwendbar ist. Jedoch zeigten sich bei niedrigen Ionenstärken deutliche Abweichungen und auch das Ionenaustausch-Experiment konnte mit dem Modell nicht nachvollzogen werden. Offensichtlich liegt dies daran, dass das Modell nur die Ionenstärke als Summenparameter berücksichtigt, jedoch nicht, durch welche Ionen in Lösung diese bewirkt wird.



### **3            Untersuchungen zur Mechanik von selbstverheilendem Versatz (SVV)**

#### **3.1            Veranlassung**

Ein Teilaspekt bei der Bewertung der Sicherheit einer Untertagedeponie für gefährliche Abfälle ist das Vermögen geotechnischer Verschlussmaterialien, den Zutritt von Lösungen zum Abfall zu verzögern oder zu vermeiden. Für den Verschluss von untertägigen Entsorgungseinrichtungen im Salinar wird der Einsatz von wasserfreiem  $\text{MgSO}_4$  diskutiert. Im Falle eines Lösungszutritts nimmt dieses freies Wasser auf und bildet unter Volumenvergrößerung Hydratphasen. Aufgrund dieses Verhaltens wird von einem *Selbstverheilenden Versatz (SVV)* gesprochen.

Um die genannten, erwünschten Eigenschaften hinsichtlich ihres Beitrags zur Abdichtung von Hohlräumen in Untertagedeponien im Salzgestein bewerten zu können, ist es notwendig, die Auswirkungen des Kristallisationsdruckes auf das umgebende Salzgebirge zu kennen. Dazu muss das langfristige mechanische Materialverhalten durch Laborversuche bestimmt und physikalisch modelliert werden. Idealerweise sollte der Kristallisationsdruck dabei aus den bei der Aufsättigung des SVV ablaufenden chemischen Reaktionen (Hydratisierung des  $\text{MgSO}_4$ ) und den sich dabei ausbildenden Mineralphasen abgeleitet werden können.

#### **3.2            Stand der Forschung**

In diesem Forschungsprojekt sollen sowohl das HM-Verhalten von Steinsalz wie auch das gekoppelte C:HM-Verhalten von Selbstverheilendem Versatz (SVV) modelliert werden. Dafür werden in erster Linie Stoffmodelle zur Beschreibung des mechanischen und hydraulischen Verhaltens für die beiden Materialien Steinsalz und SVV sowie ein chemisches Modell benötigt, das den Entwicklungsprozess des SVV bei Aufsättigung beschreibt.

In den vergangenen Jahrzehnten wurde von verschiedenen Arbeitsgruppen ein umfangreiches experimentelles und theoretisches Know-how zur Salzmechanik erarbeitet und bei Aufgabenstellungen aus dem Bereich der Abfallentsorgung im Salinargebirge angewendet. Auf dieser Grundlage wurden im Lauf der Zeit Stoffmodelle entwickelt,

die auf unterschiedlichen physikalischen und mathematischen Ansätzen und unterschiedlichen experimentellen Daten beruhen. Von allen gängigen Stoffmodellen für Steinsalz berücksichtigen nur einige wenige Stoffmodelle das Schädigungs-/Dilatanz- und Verheilungs-/Kompaktionsverhalten von Steinsalz.

Mit Ansätzen zur Modellierung dieser Prozesse sind die Stoffmodelle allerdings erst in der Lage, die im Konturbereich von Hohlräumen durch den Ausbruch entstehende und für den Langzeitsicherheitsnachweis bedeutsame Auflockerungszone qualitativ zu charakterisieren sowie in ihrer raum- und zeitlichen Entwicklung (Vergrößerung und Verkleinerung je nach Beanspruchungszustand) und ihrer Intensität zu beschreiben. Das Stoffmodell HOU/LUX gehört zu diesem Typ von Stoffmodellen, [HOU 97], [HOU 02] und [HOU 98]. Außerdem wurde eine Porositäts-Spannungs-Permeabilitäts-Beziehung entwickelt, die den Zusammenhang zwischen Mechanik (vom Stoffmodell HOU/LUX ermittelte Dilatanz und Spannungen) und Hydraulik (Permeabilität) herstellt und auch die Anisotropie der Permeabilität berücksichtigt, [HOU 02]. Diese beiden Modelle sind schon in das FEM-Programm MISES3 implementiert worden, [HOU 00], [HOU 02]. Ferner ist das Stoffmodell HOU/LUX im BMBF-Forschungsvorhaben 02 C 0720 um einen Verheilungsansatz (phs-Stoffmodell) erweitert worden, der auch in das FE-Programmpaket MISES3 implementiert wurde, [EBZ 06].

Zur Beschreibung des Kompressionsverhaltens für Salzgrus wurden in vergangenen Jahrzehnten zahlreiche Stoffmodelle (z. B. [ZHA 93], [STÜ 96], [SJA 87], [PFE 90], [HEI 91] und [KOR 98]) und ebenso zahlreiche Porositäts-Permeabilitäts-Beziehungen (z. B. [FEI 96], [MÜL 99], [PFE 98], [PFE 90]) entwickelt.

Leider können die Stoffmodelle für Steinsalz oder Salzgrus nicht direkt auf SVV übertragen werden, da der Aushärtungs- bzw. Hydratationsprozess bei diesen Stoffmodellen nicht berücksichtigt wird und sich das Kompaktionsverhalten des ausgehärteten SVV von dem Kompaktionsverhalten des Salzgruses unterscheidet. Eine Ähnlichkeit des zeitabhängigen Verhaltens könnte wegen des zeitabhängigen Erhärtungsvorganges viel eher bei Spritzbeton als bei Steinsalz und Salzgrus festgestellt werden.

Das zeitabhängige mechanische und hydraulische Verhalten von SVV während und nach dem Aushärtungs- bzw. Hydratationsprozess wurde bislang weder experimentell noch numerisch untersucht. Die GRS Braunschweig ist das einzige Institut, das sich bislang mit dem mechanischen, hydraulischen und chemischen Verhalten von SVV beschäftigt hat. Es liegen weder Untersuchungsbefunde zum langfristigen Materialver-

halten vor noch stehen für den SVV ein Stoffmodell und eine Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung zur Verfügung. Daher müssen zunächst systematische experimentelle Untersuchungen zum zeitabhängigen Kompaktions- und Kriechverhalten sowie zur porositätsabhängigen Permeabilitätsentwicklung durchgeführt werden. Bei der Stoffmodellentwicklung für SVV könnten einzelne Komponenten der beim Antragsteller vorhandenen Stoffmodelle für Steinsalz, Salzgrus und Spritzbeton herangezogen werden.

In der Zwischenzeit sind von der GRS in Versuchen Parameter des SVV bestimmt und folgende Erkenntnisse gewonnen worden [HER 07]:

- Die Endporosität beträgt  $\phi = 2 - 5 \%$ .
- Die Endpermeabilität erreicht Zahlenwerte von  $k = 10^{-18}$  bis  $10^{-20} \text{ m}^2$ .
- Die Kristallisationsdrücke reichen von wenigen bar bis hin zu 100 bar.
- Bei der Aufsättigung und anschließenden Aushärtung bildet sich eine Vielzahl mineralischer Komponenten.
- Die Menge an gebundener Lösung nimmt mit zunehmendem Abstand vom Zulauf ab.
- Der Kristallisationsdruck schwankt lokal innerhalb der Technikumsversuche.
- Spitzenfestigkeit liegt zwischen der Dilatanzgrenze und Spitzenfestigkeit von Steinsalz.
- Das geomechanische Verhalten von SVV ähnelt dem Verhalten von Steinsalz.

Im Gegensatz zu diesem Projekt wurden die obigen Erkenntnisse an SVV Material gewonnen, das nicht mit NaCl-gesättigter Lösung hergestellt wurde, sondern mit anderen Lösungen, z. B. IP21-Lösung.

### **3.3 Prüfkörperherstellung**

#### **3.3.1 Vorüberlegungen über die zu erwartenden chemischen Reaktionen und die damit verbundenen Volumenänderungen**

Entsprechend dem Projektantrag war vorgesehen, dass die für die laborativen Untersuchungen benötigten Prüfkörper aus SVV-Material ( $\text{MgSO}_4$  und gesättigte NaCl-

Lösung) von der GRS hergestellt werden, da die GRS bereits Erfahrungen mit der Prüfkörperherstellung unter Verwendung von IP21-Lösung hat. An Stelle von IP21-Lösung soll in diesem Projekt NaCl-Lösung verwendet werden, um im Hinblick auf die geochemische Modellierung die Verhältnisse zu vereinfachen und weniger unterschiedliche Elemente in der chemischen Gleichgewichtsberechnung berücksichtigen zu müssen. Zuschlagstoffe werden in den Experimenten und dann auch den chemischen Simulationen nicht verwendet, um das grundsätzlich schon komplexe chemische System auch in dieser Hinsicht möglichst einfach zu halten. Die grundsätzliche chemische Reaktion besteht in der Anlagerung von Wassermolekülen aus der NaCl-Lösung an Magnesiumsulfat, wobei von einem  $\text{MgSO}_4$ -Molekül ein, vier, fünf, sechs oder sieben Moleküle Wasser gebunden werden können. Als chemische Reaktionen sind grundsätzlich möglich:

**Tab. 3.1** Chemische Reaktionen, die die Anlagerung von Wassermolekülen an Magnesiumsulfat beschreiben

| Edukte                                | Produkte   |
|---------------------------------------|--|
| $\text{MgSO}_4 + 1\text{H}_2\text{O}$ | => $\text{MgSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (Kieserit)     |
| $\text{MgSO}_4 + 4\text{H}_2\text{O}$ | => $\text{MgSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (Starkeyit)   |
| $\text{MgSO}_4 + 5\text{H}_2\text{O}$ | => $\text{MgSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (Pentahydrit) |
| $\text{MgSO}_4 + 6\text{H}_2\text{O}$ | => $\text{MgSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (Hexahydrit)  |
| $\text{MgSO}_4 + 7\text{H}_2\text{O}$ | => $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (Epsomit)     |

Das in der zugeführten NaCl-Lösung enthaltene NaCl ist an diesen Reaktionen nicht beteiligt und wird daher in den Reaktionsgleichungen nicht berücksichtigt. Durch die Bindung von Wassermolekülen aus der salinaren Lösung in Festphasen fällt NaCl jedoch in fester Form aus und führt dabei zu einer Vergrößerung des Festphasenvolumens.

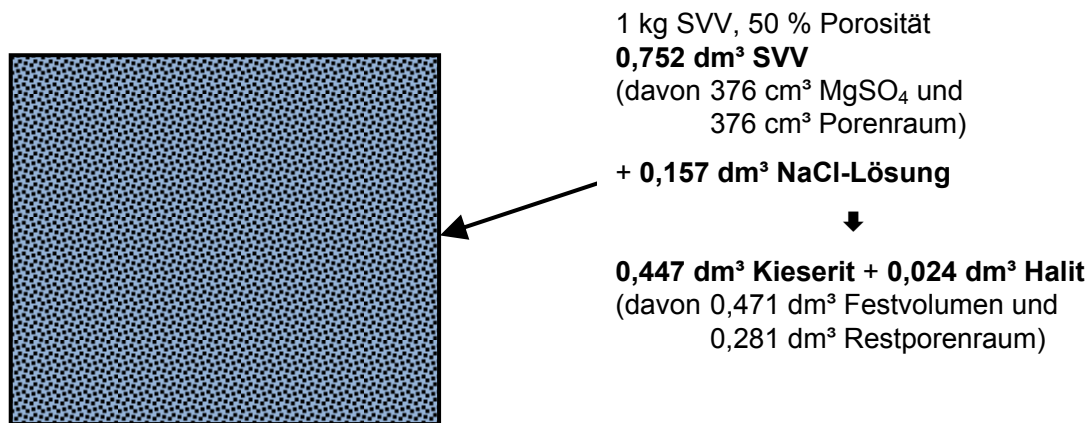
Bei den in Tab. 3.1 aufgeführten Reaktionen handelt es sich nur um jene, die zu  $\text{MgSO}_4$ -Hydrat-Phasen führen. Tatsächlich ist davon auszugehen, dass noch weitere Typen von Mineralphasen auftreten, an deren Bildung auch Na- oder Cl-Ionen beteiligt sind. Beispiel hierfür ist das Mineral Blödit ( $\text{Na}_2\text{Mg}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ), das im ausgehärteten SVV nachgewiesen wurde. Die hier vorzunehmenden Vorüberlegungen zur chemischen Modellierung beschränken sich darauf, den dominierenden Mechanismus der Wasseranlagerung an Magnesiumsulfat entsprechend Tab. 3.1 näher zu betrachten. Von Interesse sind dabei aus gebirgsmechanischer Sicht in erster Linie die Masse und

das Volumen der Reaktionspartner und des Reaktionsproduktes, um insbesondere einen Eindruck über die Volumenänderung und den damit verbundenen möglichen Druckauf- bzw. Druckabbau zu bekommen (Kristallisationsdruck). Dazu werden im Folgenden die Volumina der Edukte und Produkte bezogen auf 1 kg Magnesiumsulfat mit einer Porosität von 50 % betrachtet (Tab. 3.2). Bei den Produkten wird von einer Porosität von 0 % ausgegangen, und bei der Volumenänderung werden nur die Festvolumina betrachtet, da diese für den Druckaufbau verantwortlich sind.

**Tab. 3.2** Volumina der Produkte und Edukte der wichtigsten Reaktionen bei der Aufsättigung von  $\text{MgSO}_4$  mit NaCl-Lösung

| Reaktionsprodukt | SVV*<br>[dm <sup>3</sup> ] | NaCl-Lösung<br>[dm <sup>3</sup> ] | => | Produkt<br>[dm <sup>3</sup> ] | NaCl<br>[dm <sup>3</sup> ] | V <sub>Fest</sub> / V <sub>0</sub> [%] |
|------------------|----------------------------|-----------------------------------|----|-------------------------------|----------------------------|--|
| Kieserit         | 0,752                      | 0,157                             | => | 0,447                         | 0,024                      | 63                                     |
| Starkeyit        | 0,752                      | 0,626                             | => | 0,710                         | 0,097                      | 107                                    |
| Pentahydrat      | 0,752                      | 0,783                             | => | 0,920                         | 0,121                      | 139                                    |
| Hexahydrat       | 0,752                      | 0,939                             | => | 1,078                         | 0,145                      | 163                                    |
| Epsomit          | 0,752                      | 1,096                             | => | 1,204                         | 0,170                      | 183                                    |

\* 1 kg SVV bei 50 % Porenraum entspricht 0,752 dm<sup>3</sup>



**Abb. 3.1** Grafische Erläuterung mit Beispielrechnung zu Tab. 3.2

Aus Abb. 3.1 ist zu entnehmen, dass sich aufgrund der Anfangsporosität des SVV von 50 % das Feststoffvolumen der Produkte im Vergleich zu den Edukten mehr als verdoppeln muss, damit es zu einer Volumenvergrößerung kommt. Da sich bei der Bildung von Kieserit das Anfangsfeststoffvolumen nur auf 63 % des befüllten Volumens vergrößert, muss sich mindestens Starkeyit bilden, um insgesamt eine Volumenvergrößerung zu erhalten. Die maximale Volumenvergrößerung wird mit einem Faktor von

1,83 bei Epsomit erreicht. Werden das Feststoff- und Flüssigkeitsvolumen der Edukte addiert, so wird deutlich, dass das Ausgangsvolumen immer größer ist, als das Feststoffvolumen. Dabei ist hervorgehoben, dass sich die gesamte Volumenvergrößerung nur auf das Feststoffvolumen bezieht, da davon ausgegangen wird, dass die freie Flüssigkeit nicht am Kristallisationsdruckaufbau beteiligt ist. Wird das Volumen der flüssigen Phasen in die Betrachtung mit einbezogen, so zeigt Tab. 3.2, dass das Ausgangsvolumen von Lösung und Feststoffen bei allen Reaktionen größer ist als das Volumen der Produkte. Die bei der Reaktion auftretende Volumenvergrößerung mit Beschränkung auf das Feststoffvolumen ist demnach eine sogenannte scheinbare Volumenvergrößerung [COR 39].

Interessant ist auch, dass bei einer instantanen kompletten Aufsättigung des Porenvolumens des wasserfreien Magnesiumsulfats mit  $0,376 \text{ dm}^3$  NaCl-Lösung für jedes  $\text{MgSO}_4$ -Molekül durchschnittlich 2,4  $\text{H}_2\text{O}$ -Moleküle zur Verfügung stehen. Unter der Annahme, dass sich das Wasser bei der Aufsättigung des Porenraums möglichst gleichmäßig verteilt, bilden sich entsprechend der Verfügbarkeit von Wassermolekülen die in Tab. 3.1 aufgelisteten Produkte in einer Reihenfolge, die der Zahl der gebundenen Wassermoleküle entspricht: Kieserit, Starkeyit, Pentahydrat, Hexahydrat und als letztes Epsomit. Für den Fall, dass das gesamte Porenvolumen mit Salzlösung gefüllt ist, müssen sich demnach Kieserit und Starkeyit im Verhältnis von etwa 100:35 bilden. Das Volumen der dabei erzeugten Produkte beträgt  $0,481 \text{ dm}^3$ . Es ist also in diesem einfachen Modell nicht möglich, durch instantane homogene Aufsättigung eine Volumenvergrößerung zu erhalten! Die in diesem einfachen Modell nicht berücksichtigten, tatsächlich aber auch auftretenden Doppelsalze wie Blödit könnten zwar zu einer lokalen Volumenvergrößerung führen, aber trotz allem sollten die oben aufgeführten Reaktionsprodukte dominant sein. Somit sollten Doppelsalze nicht in der Lage sein, die integrale Volumenvergrößerung herbeizuführen.

Nicht berücksichtigt wurde bei diesen Überlegungen, dass die Volumenausdehnung durch eine gerichtete Kristallisation erfolgt, was zur Folge hat, dass sich bereits ein Kristallisationsdruck aufbaut, bevor sämtliche Poren verschlossen sind. Dies spielt jedoch bei der instantanen homogenen Aufsättigung nur eine untergeordnete Rolle, da nach der Reaktion immer noch eine Restporosität von über 28 % vorliegt. Um eine Volumenausdehnung zu erreichen, muss folglich gewährleistet sein, dass das  $\text{MgSO}_4$  mit der anfänglich vorhandenen wässrigen Lösung reagiert und nach der Reaktion das verbleibende Porenvolumen mit weiterer Lösung aufgefüllt wird, um insgesamt genü-



gend Wassermoleküle für die Ausbildung weiterer Mineralphasen bis hin zu einer Volumenausdehnung bereitstellen zu können.

**Tab. 3.3** Phasenumwandlungen, die während längerer Standzeiten als Folge der Umlagerung von Wassermolekülen innerhalb des Prüfkörpers auftreten könnten

| Mögliche Umwandlungen:*                                  | Vol. Edukte<br>[cm <sup>3</sup> ] | Vol. Produkte<br>[cm <sup>3</sup> ] | $\Delta V$<br>[%] |
|--|-----------------------------------|-------------------------------------|-------------------|
| 1 H <sub>2</sub> O + 1 MgSO <sub>4</sub> = 1 Kieserit    | 63,274                            | 53,853                              | -14,89            |
| 4 H <sub>2</sub> O + 1 MgSO <sub>4</sub> = 1 Starkeyit   | 117,320                           | 85,533                              | -27,09            |
| 5 H <sub>2</sub> O + 1 MgSO <sub>4</sub> = 1 Pentahydrit | 135,335                           | 110,771                             | -18,15            |
| 6 H <sub>2</sub> O + 1 MgSO <sub>4</sub> = 1 Hexahydrit  | 153,350                           | 129,818                             | -15,35            |
| 7 H <sub>2</sub> O + 1 MgSO <sub>4</sub> = 1 Epsomit     | 171,365                           | 144,997                             | -15,39            |
| 3 H <sub>2</sub> O + 1 Kieserit = 1 Starkeyit            | 107,899                           | 85,533                              | -20,73            |
| 4 H <sub>2</sub> O + 1 Kieserit = 1 Pentahydrit          | 125,914                           | 110,771                             | -12,03            |
| 5 H <sub>2</sub> O + 1 Kieserit = 1 Hexahydrit           | 143,930                           | 129,818                             | -9,80             |
| 6 H <sub>2</sub> O + 1 Kieserit = 1 Epsomit              | 161,945                           | 144,997                             | -10,47            |
| 1 H <sub>2</sub> O + 1 Starkeyit = 1 Pentahydrit         | 103,548                           | 110,771                             | <b>6,98</b>       |
| 2 H <sub>2</sub> O + 1 Starkeyit = 1 Hexahydrit          | 121,563                           | 129,818                             | <b>6,79</b>       |
| 3 H <sub>2</sub> O + 1 Starkeyit = 1 Epsomit             | 139,579                           | 144,997                             | <b>3,88</b>       |
| 1 H <sub>2</sub> O + 1 Pentahydrit = 1 Hexahydrit        | 128,786                           | 129,818                             | <b>0,80</b>       |
| 2 H <sub>2</sub> O + 1 Pentahydrit = 1 Epsomit           | 146,801                           | 144,997                             | -1,23             |
| 1 H <sub>2</sub> O + 1 Hexahydrit = 1 Epsomit            | 147,833                           | 144,997                             | -1,92             |
| 3 MgSO <sub>4</sub> + 1 Starkeyit = 4 Kieserit           | 221,308                           | 215,413                             | -2,66             |
| 4 MgSO <sub>4</sub> + 1 Pentahydrit = 5 Kieserit         | 291,805                           | 269,266                             | -7,72             |
| 5 MgSO <sub>4</sub> + 1 Hexahydrit = 6 Kieserit          | 356,110                           | 323,120                             | -9,26             |
| 6 MgSO <sub>4</sub> + 1 Epsomit = 7 Kieserit             | 416,548                           | 376,973                             | -9,50             |
| 1 MgSO <sub>4</sub> + 4 Pentahydrit = 5 Starkeyit        | 488,341                           | 427,664                             | -12,43            |
| 1 MgSO <sub>4</sub> + 2 Hexahydrit = 3 Starkeyit         | 304,894                           | 256,598                             | -15,84            |
| 3 MgSO <sub>4</sub> + 4 Epsomit = 7 Starkeyit            | 715,763                           | 598,729                             | -16,35            |
| 2 MgSO <sub>4</sub> + 5 Epsomit = 7 Pentahydrit          | 815,501                           | 775,394                             | -4,92             |
| 1 MgSO <sub>4</sub> + 6 Epsomit = 7 Hexahydrit           | 915,239                           | 908,724                             | -0,71             |
| 1 MgSO <sub>4</sub> + 5 Hexahydrit = 6 Pentahydrit       | 694,347                           | 664,623                             | -4,28             |
| 1 Kieserit + 3 Pentahydrit = 4 Starkeyit                 | 386,165                           | 342,131                             | -11,40            |
| 2 Kieserit + 3 Hexahydrit = 5 Starkeyit                  | 497,160                           | 427,664                             | -13,98            |
| 1 Kieserit + 1 Epsomit = 2 Starkeyit                     | 198,850                           | 171,066                             | -13,97            |
| 1 Kieserit + 4 Hexahydrit = 5 Pentahydrit                | 573,124                           | 553,853                             | -3,36             |
| 1 Kieserit + 2 Epsomit = 3 Pentahydrit                   | 343,847                           | 332,312                             | -3,35             |
| 1 Kieserit + 5 Epsomit = 6 Hexahydrit                    | 778,837                           | 664,623                             | -14,66            |
| 1 Starkeyit + 1 Hexahydrit = 2 Pentahydrit               | 215,351                           | 107,706                             | -49,99            |
| 2 Starkeyit + 1 Heptahydrit = 3 Pentahydrit              | 316,062                           | 161,559                             | -48,88            |
| 1 Starkeyit + 2 Heptahydrit = 3 Hexahydrit               | 375,526                           | 332,311                             | -11,51            |
| 1 Pentahydrit + 1 Epsomit = 2 Hexahydrit                 | 255,767                           | 259,636                             | 1,51              |

\* Reaktionen, bei denen eine wasserreichere Phase entsteht, sind unwahrscheinlich und damit irrelevant

Bei Betrachtung der chemischen Phasen des einfachen Systems zeigt sich, dass bis auf den Kieserit alle Hydrate metastabil sind, dass heißt, dass diese Mineralphasen im Lauf der Zeit wieder zerfallen. Bei vielen metastabilen Mineralphasen dauert der Zerfall so lange, dass er in der praktischen Auswirkung ohne Bedeutung ist. Wie lange die Umwandlung der Hydrate in Kieserit dauert, ist unbekannt.

Von Bedeutung können dagegen Umwandlungen der einzelnen Hydrate untereinander sein aufgrund einer inhomogenen Verteilung von NaCl-Lösung und  $\text{MgSO}_4$  im Versatzmaterial, sodass sich an manchen Stellen höhere Hydrate bilden, während an anderen noch wasserfreies  $\text{MgSO}_4$  vorhanden ist. Für diesen Fall sind folgende grundlegende Varianten möglich:

- Porenwasser reagiert mit wasserfreiem  $\text{MgSO}_4$ ,
- Porenwasser reagiert mit anderen Hydraten,
- Wasserfreies  $\text{MgSO}_4$  und ein höheres Hydrat wandeln sich in ein niedrigeres Hydrat um,
- Hydrate wandeln sich ineinander um.

Die hieraus folgenden Reaktionen sind für das einfache System aus Tab. 3.1 in Tab. 3.3 mit ihren Anfangs- und Endvolumina aufgelistet, wobei hier der Prüfkörper als abgeschlossenes System betrachtet wird und deshalb nicht nur die Festphasenvolumina, sondern auch das Volumen des Wassers berücksichtigt wird. Nicht berücksichtigt wird nach wie vor die Ausfällung von NaCl durch die Bindung von Wasser. Reaktionen, die zu einer Volumenvergrößerung führen, sind dabei gelb markiert. Reaktionen zwischen freiem Wasser und wasserfreiem  $\text{MgSO}_4$  führen dabei zu keiner Volumenvergrößerung ebenso wenig wie die Reaktionen von wasserfreiem  $\text{MgSO}_4$  mit höheren Hydraten. Bei den Hydratumwandlungen führt nur eine einzige Reaktion zur Volumenvergrößerung: die Umwandlung von Pentahydrat und Epsomit in Hexahydrat. Diese Reaktion ist jedoch unwahrscheinlich, da hierfür bereits deutlich mehr Lösung benötigt wird, als durchschnittlich zur Verfügung steht. Bei der Aufsättigung wird die zugeführte Wassermenge begrenzt, da der Versatz im eingebauten und ausgehärteten Zustand in der Lage sein soll, noch weiteres Wasser aufzunehmen, was bei schon anfänglich vorhandenen durchschnittlich sechs Wassermolekülen pro Sulfatmolekül nur noch begrenzt möglich wäre. Die einzigen Reaktionen, die unter dieser Randbedingung zu einer Volumenvergrößerung führen, sind demnach die Bindung von Wassermolekülen an Starkeyit und die Umwandlung von Pentahydrat und Wasser in Hexahydrat.

Die oben skizzierten Volumenbilanzrechnungen legen den Schluss nahe, dass Wassermulagerungen langfristig eher zu einer Verringerung des Feststoffvolumens führen werden. In der Praxis hat sich jedoch gezeigt, dass bei der Lagerung der SVV-Prüfkörper auch in luftdichten Behältern innerhalb von Monaten eine Volumenvergrößerung eintritt. Langfristig gesehen ist eine Volumenverringernng durch weitere Reaktionen grundsätzlich möglich, doch ist davon auszugehen, dass der durch die Konvergenz des Salzstocks induzierte Druckaufbau viel schneller vonstatten geht, als etwaige Schrumpfungseffekte im Bohrlochversatz, so dass die oben aufgeführten Kornvolumenreduzierungen mit hoher Wahrscheinlichkeit technisch nicht relevant sind. Untersuchungen zur Kinetik der internen Phasenumwandlungen könnten diese Schlussfolgerung absichern, waren aber im Rahmen dieses Projektes nicht vorgesehen.

Abschließend ist wichtig, nochmals darauf hinzuweisen, dass diese Vorüberlegungen nur ein einfaches System betreffen und in der Realität noch weitere Mineralphasen auftreten werden. Ziel dieser Vorüberlegungen ist es lediglich, ein grundsätzliches Verständnis von den ablaufenden Vorgängen zu vermitteln.

### **3.3.2 Prüfkörperherstellung durch Aufsättigung**

#### **3.3.2.1 Vorbemerkung**

Wie bei den Vorüberlegungen zu den geochemischen Prozessen dargelegt, ist SVV ein Material, das Wasser chemisch bindet und dadurch sein Feststoffvolumen vergrößert bzw. im Fall einer behinderten Volumenausdehnung einen Kristallisationsdruck erzeugt, ähnlich wie sich Anhydrit durch Bindung von Wassermolekülen in Gips umwandelt und dabei sein Volumen um bis zu 60 % vergrößern kann [MAD 87]. Im in-situ-Einsatz als Verschlussbauwerk wird durch das umgebende Gebirge eine Volumenausdehnung behindert, wodurch sich im SVV ein Kristallisationsdruck aufbaut, der auf das Gebirge einem Innendruck vergleichbar einwirkt. Dadurch wird die weitere Gebirgskonvergenz reduziert, und in der Auflockerungszone werden Riss-schließungen und Rissverheilungen begünstigt. Solange der Kristallisationsdruck nicht die minimale Hauptspannung des umgebenden Gebirges überschreitet, ist somit ein hoher Kristallisationsdruck im SVV von Vorteil. Um eine möglichst große Volumenausdehnung zu erreichen, ist derzeit geplant, das Versatzmaterial nicht vorab wie einen Beton anzumischen und zu verpumpen, sondern zunächst trocken einzubringen und dann erst

nachträglich durch Zuführung von Lösung aufzusättigen. Dadurch wird die bei den chemischen Reaktionen entstehende Volumenvergrößerung vollständig im Hohlraum aktiviert, so dass auch der Kristallisationsdruck extrem auftritt. Die Prüfkörperherstellung durch Aufsättigung ist das experimentelle Analogon dazu.

### 3.3.2.2 Prüfkörperherstellung bei der GRS

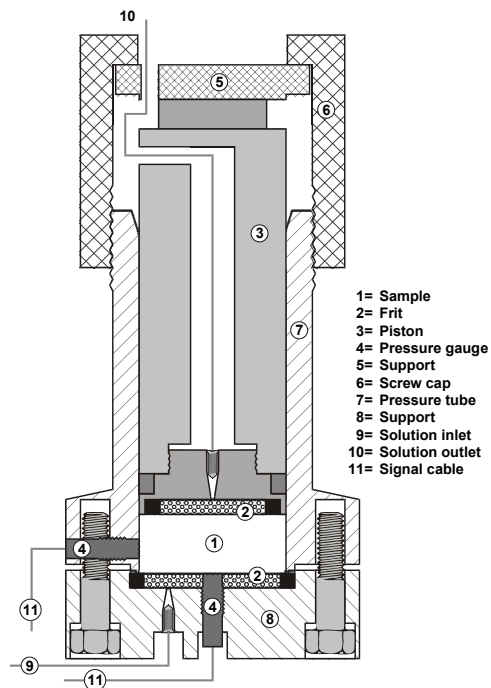
Grundsätzlich werden die Prüfkörper so hergestellt, dass wasserfreies  $\text{MgSO}_4$  in einer bestimmten Menge in eine zylindrische, metallische Prüfkörperform unkompaktiert eingefüllt wird und danach Salzlösung unter Druck zugegeben wird. Die dadurch initiierten chemischen Reaktionen führen phänomenologisch zu einer Aushärtung des granularen Ausgangsmaterials. Nach der Aushärtung wird der Prüfkörper mit Hilfe eines hydraulischen Druckstempels aus der Prüfkörperform ausgepresst.

Bei der GRS werden zwei verschiedene Typen von Prüfkörpern hergestellt, die sich in der Größe und damit auch der Anfangsmenge von wasserfreiem  $\text{MgSO}_4$  unterscheiden. Die Daten der beiden Typen sind in Tab. 3.4 aufgelistet.

**Tab. 3.4** Daten der zwei Prüfkörpertypen von der GRS

| Prüfkörper-Typ | Durchmesser [mm] | Länge [mm] | Masse $\text{MgSO}_4$<br>wasserfrei [g] |
|----------------|------------------|------------|---|
| 1              | 50               | 100        | 262                                     |
| 2              | 70               | 140        | 720                                     |

Für beide Prüfkörper-Typen wurden metallische Formen (Zellen) zur Prüfkörperherstellung und Beobachtung der nachfolgenden Prozesse entwickelt, die auf den in Abb. 3.2 dargestellten Zellen zum Messen von Quelldrücken bei Tongestein beruhen. Diese Zellen bestehen aus einem Titan-Hohlzylinder und können so sowohl mechanisch den entstehenden Drücken wie auch chemisch den verwendeten Lösungen standhalten. Die Prüfkörperherstellung erfolgt wie nachstehend beschrieben:



**Abb. 3.2** Links: Konstruktionsschema der für die Messung von Quelldrücken von Tongestein benutzten Zelle. Rechts: Foto einer der von der GRS benutzten Zellen für die Herstellung von SVV-Prüfkörpern vom Typ 2

Nach Aufbau der Apparatur mit Zelle, Druckstempel und Messtechnik werden zunächst die Sensoren zur Druckmessung mit Wasserdruck auf Funktionalität überprüft. Der Zelleninnenraum wird danach getrocknet und anschließend mit Magnesiumsulfat befüllt. Der Druckstempel wird manuell in die Form gedrückt, bis Form- und Kraftschluss mit der Reaktionssubstanz erreicht sind. Der Druckstempel bildet die Oberkante des zukünftigen Prüfkörpers. Der Stempel wird dann mit dem Oberteil der Zelle fixiert. Bei dieser Verfahrensweise liegt erfahrungsgemäß eine Anfangsporosität von ca. 50 % vor. Die Zelle ist mit zwei Anschlüssen zur Lösungszufuhr bzw. zum Luft-/Lösungsablass ausgestattet. An diese Anschlüsse werden Ventile angeschraubt. Das Ventil am Eingang wird mit einer Kapillare und der HPLC-Pumpe verschraubt. Damit sind die Vorarbeiten beendet. Der Porenraum im Magnesiumsulfat kann anschließend unter Druck aufgesättigt werden.

Als Pumpendruck wird an der Pumpe ein Druck von 3,5 MPa eingestellt. Die Fördergeschwindigkeit wird für Typ 1 auf 1 ml/min, für Typ 2 auf 2,7 ml/min vorgegeben. Von einer Datenerfassungsanlage werden folgende Parameter aufgezeichnet:

- Lösungsdruck der Pumpe,

- Druck im Inneren der Zelle,
- Umgebungs(Raum-)temperatur,
- Lösungsmasse (Lösungsvolumen bzw. Lösungsfluss), die in die Zelle gepumpt wird.

Als Reaktionslösung wird gesättigte NaCl-Lösung eingesetzt. Das Ventil am Ausgang bleibt solange geöffnet, bis der erste Lösungstropfen austritt. Danach wird das Ventil geschlossen. Durch dieses Procedere wird es ermöglicht, dass während der Lösungszugabe möglichst viel Luft aus dem Porenraum des Prüfkörpers entweichen kann. Während der Lösungszuführung baut sich zunächst in der Zelle der Fluiddruck auf, bis nach dem Verschließen der Zelle ein allmählicher Druckaufbau in der Zelle zu beobachten ist, der von einer Temperaturerhöhung infolge exothermer Reaktionen begleitet wird und den eigentlichen Prozess der Hydratbildung in der Zelle anzeigt.

Das Gesamtsystem bleibt 21 Tage lang unter Pumpendruck stehen. In dieser Zeit steigt der Innendruck bis auf den 1,5 bis 2-fachen Wert des eingestellten Pumpendruckes an. Nach 21 Tagen Reaktionszeit wird die Pumpe abgestellt und beide Ventile werden geöffnet. Aus beiden Öffnungen tritt ca. drei Tage lang ungebundene Lösung aus, die aufgefangen und ausgewogen wird. Zur Bilanzierung der Reaktionsmassen wird diese Fluidmasse von der Gesamtmasse subtrahiert. Der Probekörper härtet anschließend weitere 2 Wochen lang aus. In dieser Zeit kann der sich einstellende Kristallisationsdruck aus der Differenz zwischen Fluid- und Zelldruck bestimmt werden.

Zur Durchführung weiterführender mechanischer und/oder hydraulischer Untersuchungen wird der ausgehärtete Prüfkörper mit einer hydraulischen Presse aus der Zelle herausgedrückt. Die zum Auspressen erforderliche Stempelkraft kann bei besonders hohem Kristalldruck bis zu 200 kN betragen. Diese Stempelkraft entspricht einem Druck von 52 MPa. Insgesamt stehen bei der GRS zwei Titanzellen vom Typ 2 und eine Titanzelle vom Typ 1 für die Prüfkörperherstellung zur Verfügung.

### **3.3.2.3 Erfahrungen aus der Prüfkörperherstellung mit den Titanzellen der GRS und Schlussfolgerungen**

Planung, Entwicklung und Anfertigung der vorstehend beschriebenen Titanzellen basierten auf den bisherigen Erfahrungen der GRS mit der Prüfkörperherstellung mit IP21-Lösung. Wie schon erwähnt, war von der GRS Braunschweig geplant, die SVV-

Prüfkörper im Rahmen dieses Verbundprojektes statt wie bislang mit einer IP21-Lösung ausschließlich mit einer NaCl-Lösung herzustellen, um so die chemischen Reaktionen überschaubar zu halten und damit die ersten numerischen Simulationen des C:HM-Verhaltens von SVV nicht von vornherein von der chemischen Seite her zu komplex zu gestalten. Trotz der für überschaubar gehaltenen chemischen Reaktionen haben sich bei der Prüfkörperherstellung mit der NaCl-Lösung unerwartet folgende Komplikationen ergeben:

- Die Prüfkörperherstellung mit der NaCl-Lösung dauert nach bisherigem Erkenntnisstand mehr als doppelt so lange wie geplant, in der Größenordnung länger als fünf Wochen. Im Rahmen dieses Projektes sollten von der GRS 34 Prüfkörper für die TUC hergestellt werden. Bei einer Herstellungsdauer von mehr als eineinhalb Monaten würde selbst beim ununterbrochenen Einsatz der drei verfügbaren Zellen die Herstellung von 34 Prüfkörpern etwa zwei Jahre dauern.
- Durch die Auflösungserscheinungen und die Ausfällung von auskristallisiertem Halit in der Nähe der Einlassöffnung ist dieser Bereich des Prüfkörpers nicht ausgehärtet, Abb. 3.3. Daher muss dieser Teil entfernt werden, um für die weiterführenden mechanischen Versuche einen mineralogisch möglichst homogen aufgebauten Prüfkörper mit ebenen, lochfreien Endflächen zu erhalten. Das Verhältnis Länge zu Durchmesser eines Prüfkörpers wird damit von  $l/d = 2:1$  auf ca.  $l/d = 1,5:1$  verringert. Bei diesen Prüfkörperabmessungen werden die mechanischen Eigenschaften auch von der Prüfkörpergeometrie beeinflusst, so dass die Ergebnisse der laborativen Untersuchungen nur eingeschränkte Aussagekraft haben.
- Für das Auspressen der mit der NaCl-Lösung hergestellten Prüfkörper aus der Titanzelle sind wesentlich größere Kräfte erforderlich als zunächst angenommen. Erforderlich werden beim Auspressen Kräfte bis 200 kN, die einem Auspressdruck von 52 MPa entsprechen. Vorschädigungen bzw. Zustandsänderungen in den Prüfkörpern sind demnach unvermeidbar.

Die vorstehend aufgeführten Probleme haben sich während der Prüfkörperherstellung herausgestellt und konnten deshalb nicht in der Projektplanung der GRS berücksichtigt werden. Vor allem die längere Herstellungsdauer bei der Verwendung von NaCl-Lösung und die zu starke Belastung der Prüfkörper beim Auspressen aus der Zelle führen dazu, dass das Projekt auf diese Weise nicht sinnvoll weitergeführt werden kann. Aus diesem Grund wurde für die Fortführung der Arbeiten das folgende Konzept ausgearbeitet, bei dem die Prüfkörperherstellung in zwei Bereiche aufgeteilt wurde:



**Abb. 3.3** Foto des nicht ausgehärteten Bereichs in der Nähe der Einlassöffnung

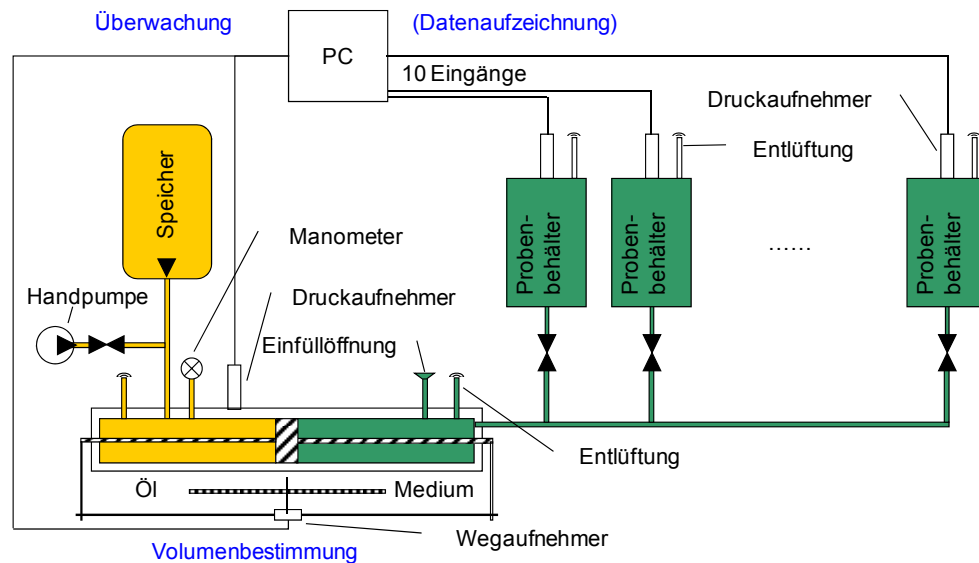
Bei der GRS wurden wie bisher Prüfkörper schwerpunktmäßig zur Untersuchung des C:HM-Verhaltens des SVV während des Aushärtungsprozesses hergestellt und die unter Kap. 3.3.2 aufgeführten Messdaten aufgenommen. Nach Auswertung der Messdaten wird eine Rezeptur erstellt, mit der an der TUC ebenfalls Prüfkörper hergestellt werden können – schwerpunktmäßig zur Untersuchung des mechanischen und des hydraulischen Verhaltens des SVV nach dem Aushärtungsprozess.

Mit diesem modifizierten Konzept zur Herstellung der SVV-Prüfkörper kann die Herstellung von Prüfkörpern für mechanische und hydraulische Untersuchungen von der Messdatenerfassung während der Aushärtung und von der Optimierung der Rezeptur abgekoppelt und dadurch vereinfacht und parallelisiert werden. Um den Zeitplan zumindest in Grundzügen einhalten zu können, werden zehn neuartige Zellen benötigt, die vom geomechanischen Labor der TUC vergleichsweise kostengünstig hergestellt werden können.

#### **3.3.2.4 Prüfkörperherstellung an der TUC**

Ziel der Prüfkörperherstellung an der TUC ist eine deutliche zeitliche Verkürzung der Prüfkörperherstellung mit gleichzeitiger Verbesserung der mechanischen Qualität der Prüfkörper. Aus diesen Gründen wurde an der TUC eine Anlage aufgebaut, mit der bis zu zehn Prüfkörper simultan hergestellt werden können (Abb. 3.4).



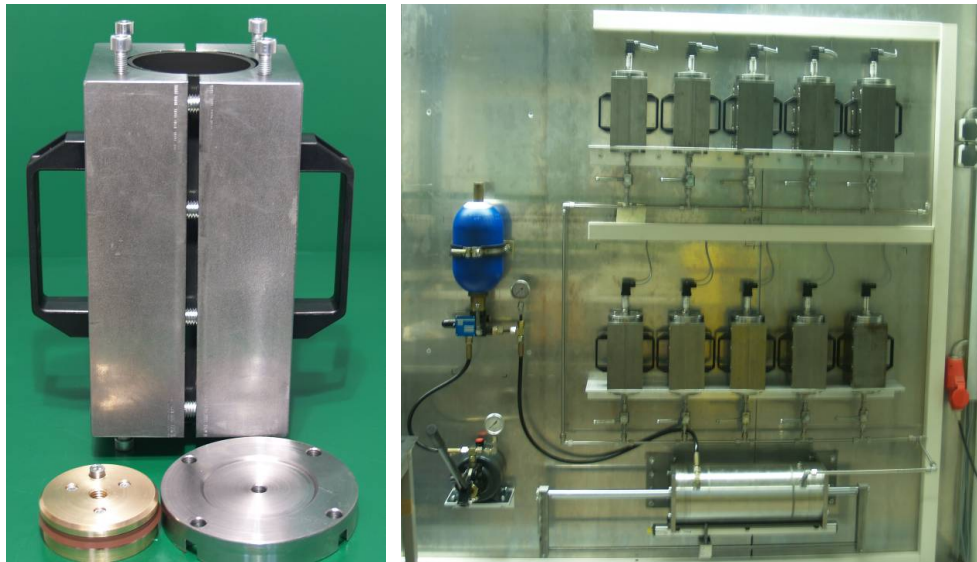


**Abb. 3.4** Schematische Darstellung der SVV-Anlage an der TUC

Um die erforderliche Qualität der Prüfkörper bei der Herstellung sicherstellen zu können, wurde bei der TUC folgendes Konzept für die einzelnen Zellen entwickelt: Statt des von der GRS verwendeten (sehr teuren) Titanstahls wird für die SVV-Zellen normaler Stahl verwendet, der aber durch Gummimantel und Messingdeckel von der aggressiven Salzlösung isoliert wird. Die Zellen sind nicht aus einem Hohlzylinder, sondern aus zwei zusammengeschraubten Halbschalen aufgebaut, so dass die Prüfkörper ohne nennenswerte mechanische Krafteinwirkung ausgebaut werden können. Für die Zellen werden Druckaufnehmer aus Säure resistentem Hasteloy verwendet. Der Zellinnenraum ist etwas länger gestaltet, so dass ein Verhältnis Länge zu Durchmesser von  $l/d = 2:1$  für den Prüfkörper auch bei der erwarteten Auflösung an der Einlassseite eingehalten werden kann (Abb. 3.5).

Von diesen Zellen sind insgesamt zehn Stück angefertigt und mit weiteren Aggregaten zu einer SSV-Anlage zusammengebaut worden. Zum Einpressen der Lösung mit konstantem Druck wird aus Kostengründen statt einer chemisch resistenten Pumpe ein Gleichgangzylinder eingesetzt und das von ihm verpresste Lösungsvolumen über einen Wegaufnehmer gemessen. Die wichtigsten Unterschiede zwischen den Tintanzellen der GRS und den an der TUC entwickelten Zellen sind:

- Die Zellen der GRS bestehen aus Titanstahl, während die SVV-Zellen der TUC aus normalem Stahl bestehen, aber durch Gummimantel und Messingdeckel von der aggressiven Salzlösung isoliert sind.

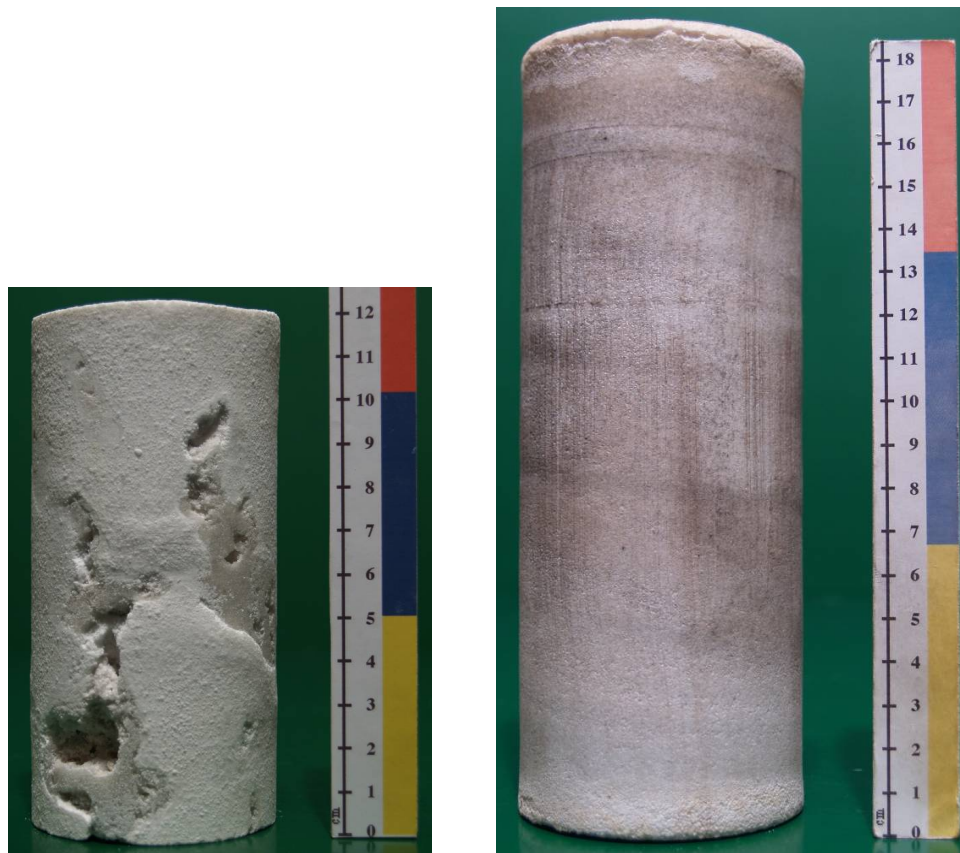


**Abb. 3.5** Links: Aufbau der Zelle der TUC, Rechts: Gesamtbild der SVV-Anlage mit den zehn Zellen

- Die Zellen sind bei der TUC aus zwei zusammengeschraubten Halbschalen aufgebaut, bei der GRS bestehen sie aus einem Hohlzylinder.
- Durch den etwas längeren Zellinnenraum kann bei den TUC-Zellen ein Verhältnis von  $l/d = 2:1$  von Länge zu Durchmesser des Prüfkörpers eingehalten werden.
- Der Lösungseintritt wird nicht für jede Zelle mit einer separaten Pumpe gesteuert; nunmehr werden die zehn Zellen gleichzeitig aufgesättigt.
- Der Zellendruck während der Aufsättigungs- und Aushärtungsphase und die gebundene Lösungsmenge werden am Ende integral für die zehn Zellen bestimmt, während bei der GRS die beiden Parameter in jeder Zelle in ihrem zeitlichen Verlauf gemessen werden.
- Durch den Halbschalenaufbau können die Prüfkörper ohne nennenswerte mechanische Krafteinwirkung ausgebaut werden. Ein hoher Auspressdruck ist nicht erforderlich.
- Mit dem neuen Konstruktionskonzept der TUC ist gewährleistet, dass die Kosten für die Zellen vergleichsweise gering sind und zehn Prüfkörper gleichzeitig hergestellt werden können.

Mit dieser Anlage sind seit Oktober 2006 die in Tab. 3.5 aufgelisteten Prüfkörper hergestellt worden. Die ersten Prüfkörper waren von stark unterschiedlicher Qualität, angefangen bei stark kavernösen Prüfkörpern entsprechend Abb. 3.6 (links) bis zu

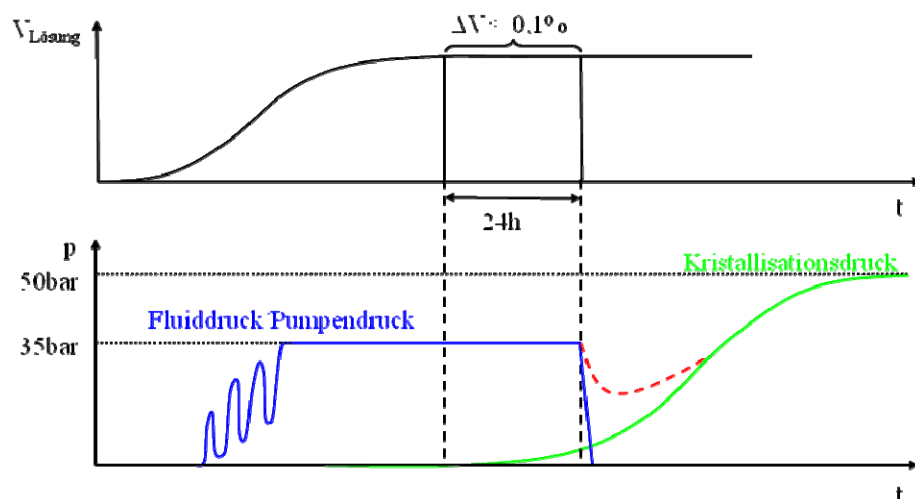
äußerlich fast homogenen Prüfkörpern entsprechend Abb. 3.6 (rechts). Um hier die Qualität der Prüfkörper zu verbessern und zu verstetigen, wurde das Herstellungsverfahren optimiert, z. B. wurde ein Verstopfen der Leitungen durch Einfügen von Filterpapier an der Einlassöffnung verhindert oder es wurden undichte Teflonverschlüsse durch Messingteile ersetzt. Zudem wurde der Aufsättigungsprozess variiert, indem der Enddruck von 35 bar in verschiedenen Zeiträumen – so schnell wie möglich, 30 min, 1 h, 3 h – angefahren wurde. Dabei hat sich gezeigt, dass die Aufsättigungsgeschwindigkeit auf die Prüfkörperqualität keinen nennenswerten Einfluss hat. Einen feststellbaren Einfluss hat allerdings die verwendete Masse von wasserfreiem  $\text{MgSO}_4$  bzw. die Anfangsporosität des  $\text{MgSO}_4$ , die nach Befüllung in den Zellen vorliegt. Zur Untersuchung dieses Parameters sind drei Prüfkörper mit 987,6 g (bisher verwendete Menge an SVV), drei weitere mit 967,6 g und schließlich drei mit 1007,6 g befüllt worden. Unabhängig von der Anfangsmasse an SVV schwanken die später ermittelten Materialparameter sehr stark. Tendenziell wirkt sich eine größere Masse allerdings eher positiv aus, da die Prüfkörper kompakter werden und somit nur noch im geringen Maß kavernös sind.



**Abb. 3.6** Links: kavernöser Prüfkörper (SVV109); Rechts: äußerlich sehr homogener Prüfkörper (SVV111)

Ein Parameter zur Überprüfung der Realitätsnähe der chemischen Simulationen und zur Abschätzung der sich bildenden Phasen ist die Masse an Lösung, die bei der Prüfkörperherstellung gebunden wird. Während bei der TUC die Fluidmasse nur integral über die Masse des Prüfkörpers nach dem Ausbau gemessen wird, wird bei der GRS auch der zeitliche Verlauf der Aufsättigung aufgezeichnet. Zur Charakterisierung des Verlaufs des Aushärtungsprozesses ist die gebundene Lösungsmasse jedoch nicht direkt nutzbar, da sie nur einen Indikator darstellt, der angibt, wie viel Lösung für die Reaktion zur Verfügung steht, aber nicht, wie viel der angebotenen Lösung bereits reagiert hat. Indikator für den Fortschritt des Aushärtungsprozesses ist dagegen der Kristallisationsdruck.

Für den zeitlichen Verlauf dieser beiden Parameter, eingepresste Lösungsmenge und Zelldruck bzw. Kristallisationsdruck, wurde die in Abb. 3.7 dargestellte Arbeitshypothese aufgestellt. Danach erfolgt zunächst der Lösungszutritt über mehrere Tage hinweg, wobei sich in etwa parallel hierzu der Fluiddruck unregelmäßig aufbaut, bis er den vorgegebenen Wert von  $p = 35$  bar erreicht, der dann bis zum Ende der Aufsättigung konstant gehalten wird. Die Aufsättigung soll beendet werden, sobald sich die eingepresste Lösungsmenge innerhalb eines Tages um nur noch weniger als 0,1 % verändert. Anschließend soll sich über mehrere Tage hinweg ein Kristallisationsdruck ausbilden, der anfangs durch den abfallenden Fluiddruck überlagert ist, später diesen jedoch übersteigt und im Lauf der Zeit einen Wert von  $P_K \approx 50$  bar anstrebt.



**Abb. 3.7** Schematische Darstellung des zeitlichen Verhaltens von eingedrungener Lösung (oben) und Kristallisationsdruck (unten)

In der Folgezeit hat sich bei der Prüfkörperherstellung gezeigt, dass diese Arbeitshypothese die Realität jedoch nicht ganz zutreffend abbildet. So dringt der Großteil der Lösung sehr schnell ein, etwa 80 – 90 % innerhalb der ersten 4 – 5 h bei einem Druck von weniger als 1 bar. Der tatsächlich gemessene Verlauf des Kristallisationsdruckes ist in Abb. 3.8 dargestellt und entspricht ebenfalls nicht ganz der Arbeitshypothese. Auffällig sind als erstes relativ starke, sinusförmige Schwankungen, die mit den aufgetragenen Temperaturen korrelieren. Es ist also davon auszugehen, dass durch die Temperaturschwankungen von ein paar Grad über einen Tag hinweg sich in der Zelle der vorhandene Druck auf- bzw. abbaut. Gestützt wird diese These durch den Druckverlauf von Prüfkörper Pk4, der in einem temperierten Raum hergestellt wurde und deutlich weniger schwankt. Da die Temperaturschwankungen relativ klein sind, wurde die Annahme getroffen, dass zwischen Druckaufbau und Temperatur ein linearer Zusammenhang besteht. Darauf aufbauend sind die Kristallisationsdrücke wie folgt berechnet worden (ohne Temperatureinfluss):

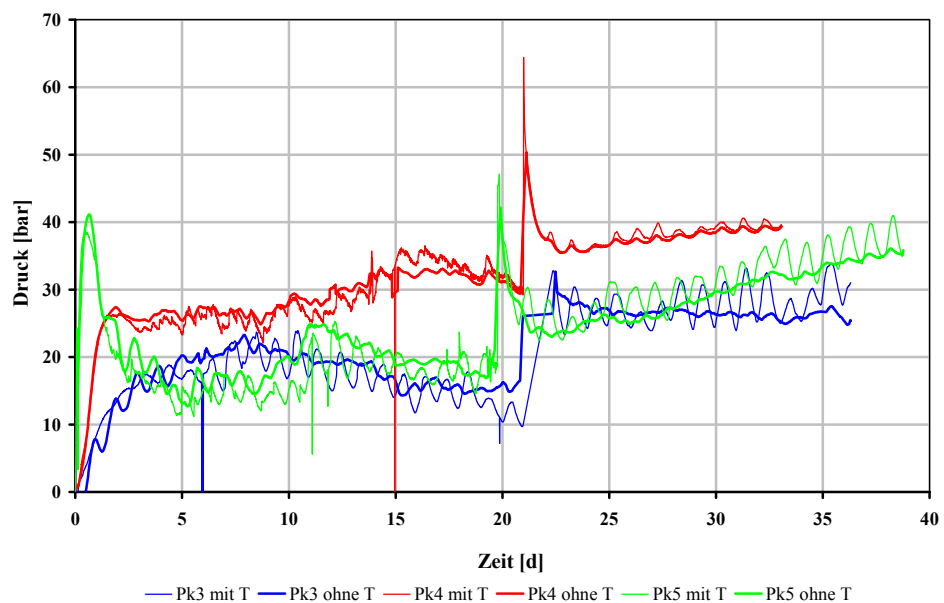
$$P_{Kristall}(t) = P_{Zelle}(t) - P_{Fluid}(t) - (T_0 - T(t - a)) \cdot b \quad (3.1)$$

mit  $P_{Kristall}(t)$  = Kristallisationsdruck [bar],  $P_{Zelle}(t)$  = gemessener Zelldruck [bar],  $P_{Fluid}(t)$  = eingestellter Fluiddruck [bar],  $T_0$  = Temperatur beim Absperren der Zellen [°C],  $T(t)$  = Raumtemperatur [°C],  $a$  = verzögerte Zeit bis zur Auswirkung der Temperaturänderungen [130 min] und  $b$  = temperaturbedingte Druckänderungen [2,3 bar/°C].

Der Parameter  $a$  wird über den zeitlichen Versatz der Maxima von Temperaturverlauf und Zelldruckverlauf ermittelt und gibt an, wieviel Zeit benötigt wird, bis die Zelle ihre Temperatur an die Raumtemperatur anpasst. Der Parameter  $b$  wird so gewählt, dass die periodischen Schwankungen des Verlaufs des Kristallisationsdrucks so klein wie möglich sind. Die so korrigierten Kristallisationsdruckverläufe sind ebenfalls in Abb. 3.8 dargestellt. Trotz dieser Korrektur ist aus den Verläufen des gemessenen Zelldrucks kein allen Messkurven zugrunde liegender eindeutiger Zusammenhang erkennbar. Es kann weder der in der Arbeitshypothese zugrunde gelegte Verlauf des Kristallisationsdrucks noch kann ein linearer, exponentieller oder ein einem Potenzansatz folgender Verlauf aus den Kurven entnommen werden. Als Ursache hierfür erscheint hauptsächlich der große Unterschied zwischen den Endkristallisationsdrücken, der zwischen 6 und 96 bar liegt. Gegenüber dem Anfangsdruck von 35 bar wird also nicht nur grundsätzlich ein Druckaufbau, sondern gelegentlich auch ein Druckabbau beobachtet. Eine Erklärung hierfür könnte sein, dass der Kristallisationsdruck sich lokal unterschiedlich im Prüfkörper und damit auch im Bereich des Drucksensors aufbaut,

abhängig davon, wie viel Lösung in die Nähe des Drucksensors gelangt ist bzw. ob sich eine ausgehärtete Schicht vor dem Sensor bildet. Unterstützt wird diese These durch die von der GRS im Projekt SVV2 durchgeführten Großversuche, bei denen drei Drucksensoren verwendet werden, die jeweils unterschiedliche Druckverläufe registrieren.

Fazit: Der Kristallisationsdruck ist mit Blick auf die Validierung der späteren rechnerischen Simulation während der Prüfkörperherstellung der wichtigste Parameter, da er als einziger messbarer Parameter auch den Verlauf des Aushärtungsprozesses charakterisiert und damit auch den einzigen Indikator für diesen Prozess darstellt. Aufgrund der starken Schwankungen von Prüfkörper zu Prüfkörper und im Lauf der Zeit ist hier jedoch kein Trend erkennbar, aus dem sich ein eindeutiger Zusammenhang für den Hydratisierungsgrad ableiten lässt.



**Abb. 3.8** Zeitlicher Verlauf des Kristallisationsdrucks mit und ohne Temperaturschwankungen von drei Prüfkörpern der GRS

### **3.3.3 Prüfkörperherstellung durch Anmischen**

#### **3.3.3.1 Vorüberlegungen**

Die im später folgenden Kap. 3.4 vorgestellten Ergebnisse der gesteinsmechanischen Kurzzeitversuche zu Festigkeit und Verformungsmodul von SVV-Prüfkörpern, die durch Aufsättigung hergestellt wurden, weisen sehr starke Schwankungen / Streubreiten auf. Bei der Lagerung der Prüfkörper hat sich gezeigt, dass eine weitere inhomogene Volumenausdehnung stattfindet, charakterisiert durch Zunahme um bis zu 3 mm in der Länge und um bis zu 1 – 2 mm im Durchmesser, trotz einer Zwischenlagerung der Prüfkörper in geschlossenen Plastiktüten bei einer Raumlufffeuchtigkeit von unter 20 %. Der Aushärtungsprozess ist demnach auch nach drei Wochen künstlicher Aufsättigung und anschließender Standzeit von etwa zwei Wochen noch nicht abgeschlossen. Da anzunehmen ist, dass sowohl die Schwankungen in den Materialeigenschaften wie auch der sich fortsetzende Aushärtungsprozess auf Inhomogenitäten im Prüfkörper zurückzuführen sind, wurde beschlossen, von dem Verfahren der Aufsättigung unter Druck Abstand zu nehmen und ein neues Verfahren zur Prüfkörperherstellung zu erarbeiten mit dem Ziel, möglichst homogene Prüfkörper herzustellen. Erreicht werden soll dieses Ziel durch eine vorlaufende schnelle Vermischung von SVV und Salzlösung und die Einbringung dieser Mischung in die Prüfkörperform, um so eine möglichst homogene Verteilung der chemischen Phasen zu erhalten. Entwicklung und Größe des Kristallisationsdruckes sind damit allerdings nicht mehr vollständig messbar.

#### **3.3.3.2 Entwicklung einer Verfahrenstechnik zur Prüfkörperherstellung**

In einer ersten Verfahrensvariante wurde SVV mit der Salzlösung zusammengeschüttet und verrührt. Die ersten Versuche hierzu erfolgten in einem Becherglas. Zum Vermischen wurde ein Magnetrührer eingesetzt. Dabei hat sich bewährt, zuerst die vorgegebene Menge SVV in das Becherglas einzufüllen und anschließend die Salzlösung unter Rühren hinzuzugeben. Da bei der Aufsättigung der Prüfkörper das Verhältnis von Wassermasse zu SVV-Masse bei durchschnittlich 2,94 Wassermolekülen zu 1 Molekül  $\text{MgSO}_4$  liegt, müssen sich mindestens zwei verschiedene Phasen und zwar Kieserit und Pentahydrat bilden. Aus diesem Grund wurde versucht, mit dem entsprechenden Verhältnis von Salzlösung zu SVV gezielt Kieserit und Pentahydrat herzustellen. Die Herstellung von möglichst reinem Kieserit scheitert daran, dass sich bei der Wasser-

zugabe sofort höhere Hydrate bilden und eine große Menge SVV wasserfrei unreaktiert zurückbleibt. Für das Anrühren von Pentahydrat wird mehr als die doppelte Menge an Lösung benötigt wie in den bisherigen Aufsättigungsversuchen. Die Aushärtung dauert hier deutlich länger, wobei ein Teil der Lösung nicht reagiert. Zudem findet der größte Teil der Volumenvergrößerung bereits im Rührbehälter statt und kann nicht mehr zum Aufbau eines Kristallisationsdruckes beitragen. Zusätzlich hat sich die Fähigkeit des Materials, weitere Lösung unter weiterer Volumenzunahme zu binden, deutlich verringert. Aus diesen Gründen wurde auf eine Änderung des Mischungsverhältnisses verzichtet.

In einer zweiten Verfahrensvariante zur Herstellung von Prüfkörpern wurde nunmehr so vorgegangen, dass das SVV-Material in einem Mischbehälter mit einem Volumen von ca. 5 l angerührt wurde. Als Rührgerät wird eine Bohrmaschine mit einem Rührer von ca. 100 mm Durchmesser verwendet. Bereits beim Rühren war erkennbar, dass die Durchmischung nicht optimal ist und zum Rand des Mischbehälters weniger Lösung vordringt als in der Mitte vorhanden ist. In der Mitte entsteht während des Rührens jedoch ein relativ homogener Bereich, der groß genug ist, um daraus einen Prüfkörper mit den vorgegebenen Abmessungen herzustellen. Im Vergleich zu den Versuchen im Reagenzglas zeigt sich, dass sich die Zeit, bis das SVV wegen der Aushärtung nicht mehr verrührt werden kann, von 30 bis 40 s auf etwa 20 s halbiert und sich die Mischung deutlich stärker erwärmt. Sichtbar wird die Erwärmung dadurch, dass die noch nicht gebundene Lösung anfängt zu kochen und teilweise zu verdampfen, woraus sich auf eine Reaktionstemperatur von über 108 °C schließen lässt<sup>1</sup>. Nach 24 h wurde der Mischbehälter geleert und der ausgehärtete Inhalt gesichtet. Deutlich waren Risse zu erkennen, die den gesamten SVV-Körper durchzogen. Wahrscheinlich entstehen diese Risse durch die verdampfende Lösung, die ihr Volumen dabei vervielfacht und dadurch Druckspannungen im Material verursacht, die diese Risse erzeugen. Somit ist diese Methode wegen der zu großen Wärmeentwicklung und der damit letztendlich verbundenen Rissbildung zur Herstellung von Prüfkörpern nicht geeignet.

In einer dritten Verfahrensvariante wurden für die nächsten Versuche analog zu Versuchen mit Salzbeton Plastikrohre mit 100 mm Durchmesser und ca. 300 mm Länge mit eng schließenden Deckeln verwendet. In einem ersten Versuch wurde ein derartiges

---

<sup>1</sup> Dieser Befund wird auch durch die Versuche von der GRS an axial gelochten Prüfkörpern bestätigt, wo eine Temperatur von bis zu 113 °C gemessen wurde.



Rohrstück, das auf einer Seite mit einem Deckel abgeschlossen ist, mit 1 kg SVV gefüllt, anschließend die entsprechende Menge Salzlösung von 0,45 kg hinzugegeben, danach sofort der zweite Deckel aufgesetzt und das Rohr mit den Deckeln 10 s lang kräftig geschüttelt. Das Ergebnis war ein im Vergleich zum Durchmesser relativ kurzer, aber optisch homogener Prüfkörper (Abb. 3.9). In Folgeversuchen hat sich jedoch gezeigt, dass sich Prüfkörper im Verhältnis  $l/d = 2:1$  auf diese Weise nicht herstellen lassen, da die Durchmischung durch das Schütteln zwar bei kleinen Mengen sehr gut funktioniert, aber bei größeren Mengen an Lösung und SVV nicht mehr die homogene Vermischung erreichen lässt.

In einer vierten Verfahrensvariante sind aus diesem Grund in den nächsten Versuchen SVV und Salzlösung über einen Trichter gleichzeitig in die Rohrstücke gefüllt worden, um so vor dem Schütteln bereits eine grobe Durchmischung zu erhalten. Beim nachfolgenden Schütteln hat sich herausgestellt, dass eine auf- und abwärts gerichtete Bewegung günstiger ist als eine annähernde Rotationsbewegung in Form eines Hin- und her-Kippens. Mit dieser Methode sind schließlich mehrere Prüfkörper hergestellt worden, an denen dann auch Triaxialversuche zur Ermittlung der mechanischen Eigenschaften durchgeführt wurden, siehe nachfolgenden Kap. 3.4.3.



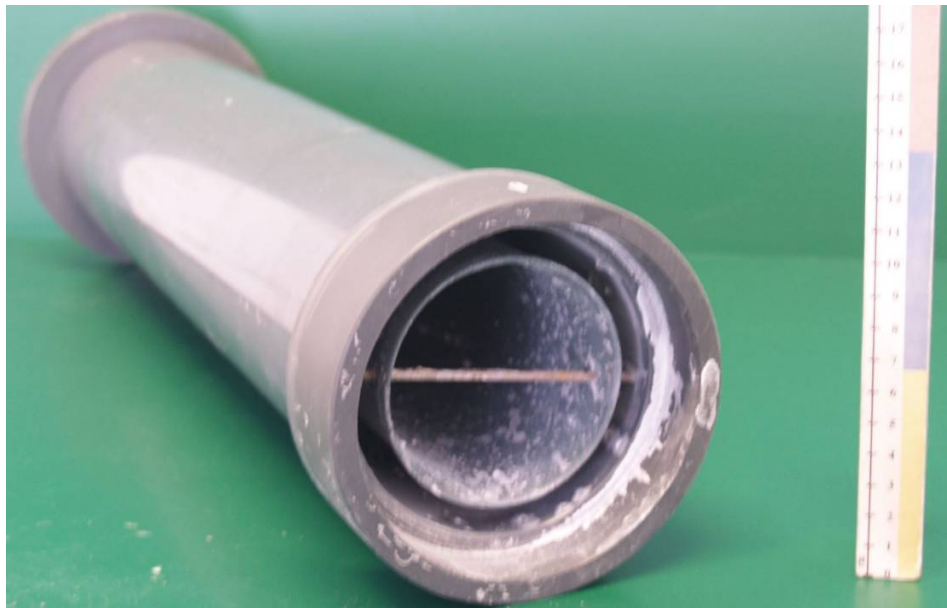
**Abb. 3.9** Durch Anmischen hergestellter Prüfkörper SVV201 (aufgesägt)  
Die roten Färbungen stammen vom verwendeten Sägeblatt und haben nichts mit dem Prüfkörper zu tun

Ein Unsicherheitsfaktor bei dieser Methode ist das Zusammenschütten, da dieses per Hand nach Gefühl erfolgt und innerhalb von ca. 2 s erledigt sein muss, um schon eine hinreichende Durchmischung erreicht zu haben, bevor dann Reaktionen mit einer Verklumpung einsetzen. Damit kann nicht gewährleistet werden, dass alle Prüfkörper systematisch in gleicher Qualität hergestellt werden, da zeitbezogen bei einem Prüfkörper zuerst zu viel SVV, bei einem anderen zuerst zu viel Salzlösung in den Trichter gegeben wird. Durch das Schütteln wird diese Ungleichmäßigkeit zwar in der Tendenz ausgeglichen, doch nur innerhalb von kleineren räumlichen Bereichen.

Aus diesem Grund wurde in einer fünften Verfahrensvariante eine Schüttapparatur entwickelt, die zwei Behälter hat: einen Behälter für SVV und einen Behälter für Salzlösung, sodass beide Stoffe gleichzeitig eingefüllt werden können. Um das Einfüllen zu beschleunigen, wurde für die Grundform der Schüttapparatur ein Rohrstück verwendet, das sich auf die Plastikrohre, in denen die Prüfkörper hergestellt werden, stülpen lässt. Der zweite Behälter wurde durch ein zweites kleineres Rohrstück realisiert, das in das größere Rohr geklebt wurde. Zur Prüfkörperherstellung wird die Schüttapparatur mit den entsprechenden Mengen SVV und Salzlösung befüllt und das Rohr des Prüfkörpers aufgesetzt und mit einem Deckel verschlossen. Danach muss die Konstruktion nur noch umgedreht werden und SVV und Salzlösung fallen in den Probenbehälter, der darauf mit dem zweiten Deckel verschlossen und geschüttelt wird. Die Prüfkörperherstellung mit dieser Methode hat jedoch noch dasselbe Problem wie die Durchmischung durch Rühren: Die exotherme Reaktion führt zu einer so starken Wärmeentwicklung, dass Wasser verdampft und zur Bildung von Rissen führt. Abb. 3.10 zeigt die Schüttapparatur und Abb. 3.11 exemplarisch einen damit hergestellten Prüfkörper, der durch die starke exotherme Reaktion über die Verdampfung des Porenwassers starke Risse aufweist.

In einer sechsten Verfahrensvariante wurde versucht, SVV mit Salz zu vermischen, auf Temperaturen knapp unter dem Gefrierpunkt abzukühlen und anschließend Eis zuzugeben und zu verrühren. Auf diese Weise sollten die Schwierigkeiten, die aus der Notwendigkeit einer schnellen Vermischung und dem starken Temperaturanstieg resultieren, umgangen werden. In einem ersten Versuch wurde die entsprechende Menge an SVV mit NaCl verrührt und auf unter 0 °C abgekühlt. Anschließend wurde fein zerkleinertes Eis hinzugegeben und mit der SVV-NaCl-Mischung verrührt. Dabei hat sich gezeigt, dass die Reaktion wesentlich langsamer abläuft und somit zum einen für das Verrühren mehrere Minuten zur Verfügung stehen und zum anderen auch die Reaktionsenergie langsamer freigesetzt wird. Dabei wird ein so großer Teil der frei

werdenden Reaktionsenergie für die Aggregatsänderung des Eises benötigt, dass sich die Probe gerade auf 30 – 40 °C erwärmt.



**Abb. 3.10** Schüttbehälters mit einer runden Innenkammer und einem Ringraum für SVV und NaCl-Lösung



**Abb. 3.11** Prüfkörper SVV220; bei der Herstellung kam es zum Kochen der Probe und durch die zustandsänderungsbedingte Volumenausdehnung zu Zugspannungen, die den Prüfkörper in mehrere Stücke zerteilt haben

Dieses Verfahren hat jedoch einen großen Nachteil: Der hergestellte Prüfkörper war so porös, dass er an vielen Stellen mit den Fingern eingedrückt werden konnte. Die Ursache hierfür ist, dass das Anmischen mit Eis den Nachteil hat, dass das Eis im Gegensatz zum Wasser nicht in die Porenräume eindringt, sondern sogar noch zusätzliche Porenräume schafft. Verschlimmert wird diese Situation dadurch, dass sich

das Volumen von  $\text{H}_2\text{O}$  beim Übergang vom festen in den flüssigen Aggregatzustand sogar noch verringert und zwar um etwa 10 %. Zusammen führen diese Effekte dazu, dass das Ausgangsvolumen, das sich aus dem Volumen des SVV zuzüglich dem Volumen des Eises zusammensetzt, um etwa 43 % größer ist als bei der Verwendung von Wasser. Aus diesem Grund können mit diesem Verfahren nur extrem poröse Prüfkörper hergestellt werden.

Das endgültige Verfahren, mit dem schließlich die noch benötigten Prüfkörper hergestellt wurden, beruht auf der oben vorgestellten Variante vier: SVV wird zusammen mit der Lösung über einen Trichter in ein Plastikrohr gefüllt, dieses wird schnell verschlossen, ca. 3 s lang geschüttelt und dann mindestens 24 h lang stehen gelassen. Um die starke Wärmefreisetzung in den Griff zu bekommen, wird vor dem Mischen sowohl die NaCl-Lösung wie auch das SVV auf knapp unter  $0^\circ\text{C}$  temperiert. Auf diese Weise tritt zwar immer noch eine starke Wärmeentwicklung ein, doch wird der Siedepunkt der NaCl-Lösung nicht überschritten. Sofern das Einfüllen von SVV und Lösung gleichmäßig und schnell gelingt, können mit dieser Methode Prüfkörper ausreichend schnell und mit akzeptablen Streubreiten hergestellt werden.

### **3.4 Kurzzeitversuche unter triaxialer Kompressionsbeanspruchung zur Ermittlung der Festigkeitsparameter**

#### **3.4.1 Versuchsaufbau und Versuchstechnik**

Die Versuche zur Bestimmung der Bruch- und Dilatanzfestigkeit werden auf den in Abb. 3.12 gezeigten Prüfmaschinen durchgeführt. Belastungsrahmen und Triaxialzellen sind so konstruiert, dass die Versuche entsprechend dem Kármán-Prinzip durchgeführt werden können, d. h. der auf die Mantelfläche des Prüfkörpers wirkende laterale Fluidruck (Manteldruck)  $\sigma_2 = \sigma_3$  und der Axialdruck  $\sigma_1$  können unabhängig voneinander geregelt werden. Mit den verwendeten Triaxialprüfanlagen können Manteldrücke bis zu  $\sigma_{2,3} = 75 \text{ MPa}$  erzeugt werden.

Die messtechnische Überwachung der Kurzzeitversuche unter triaxialer Kompressions- und Extensionsbeanspruchung erfolgt mittels dreier um jeweils  $120^\circ$  versetzt angeordneter Induktivwegaufnehmer zur Erfassung der axialen Prüfkörperstauchung sowie zweier Absolutdruckaufnehmer zur Messung der axialen und radialen Prüfkörperbelastung.

Um die Prüfkörper gegen das Eindringen des Druckmediums zu schützen, werden sie vor Einbau in die Triaxialzelle mit einer undurchlässigen 3 mm dicken, flexiblen Gummiummantelung versehen.



**Abb. 3.12** 2500 kN-Druckprüfanlagen der Professur für Deponietechnik und Geomechanik

Nach dem Einbau der Prüfkörper in die Triaxialzelle erfolgt die eigentliche Versuchssteuerung mit gleichmäßiger isotroper Belastung der Prüfkörper bis zum Niveau des vorgegebenen Manteldrucks. Die Versuchstemperatur entspricht dabei der Betriebstemperatur der Hydraulikflüssigkeit im Hydraulikkreislauf (25 °C). Bei den TC-Versuchen wird ausgehend von einem isotropen Spannungszustand der Prüfkörper bei konstantem Manteldruck  $\sigma_2 = \sigma_3$  mit einer konstanten Stauchungsrate von  $\dot{\epsilon}_1 = 0,25 \text{ \%}/\text{min}$  ( $4,17 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ) bis zum Erreichen der vorgegebenen Maximalstauchung belastet. Die für die Versuchsauswertung erforderliche messtechnische Erfassung der Axialstauchung erfolgt mittels dreier um jeweils 120° versetzt angeordneter Induktivwegaufnehmer. Der auf die Prüfkörper einwirkende Axialdruck wird durch Umrechnung des Mittels Absolutdruckaufnehmer im Prüfzylinder gemessenen Hydraulikdruckes ermittelt.

### 3.4.2 Versuchsauswertung

Während der Kurzzeitversuche unter triaxialer Kompressionsbeanspruchung werden in Zeitintervallen von 0,5 Sekunden die Messwerte der drei Induktivwegaufnehmer sowie des Absolutdruckaufnehmers abgefragt und elektronisch gespeichert. Aus diesen Daten erfolgt die Berechnung der Axialverzerrung  $\varepsilon_1$  der Prüfkörper entsprechend Gleichung (3.2).

Bei der Beschränkung auf kleine Verformungen ( $\varepsilon \leq 2 \%$ ) kann die Berechnung der Verzerrungen entsprechend der üblichen Verzerrungsdefinition als technische Verzerrung  $\varepsilon_t$  vorgenommen werden. Die technische Verzerrung ergibt sich als Quotient aus der vertikalen Veränderung der Prüfkörperlänge  $\Delta l$  und der Anfangslänge  $l_0$ :

$$\varepsilon_t = \frac{\left( \frac{l_1 + l_2 + l_3}{3} \right)}{l_0} \cdot 100 \% = \frac{\Delta l}{l} \cdot 100 \% \quad (3.2)$$

mit  $\varepsilon_t$  = technische Verzerrung [%],  $l_1, l_2, l_3$  = mit den drei Induktivwegaufnehmern gemessene Axialverformung [mm],  $l_0$  = Länge des unbeanspruchten Prüfkörpers [mm] und  $\Delta l$  = gemessene Axialverformung des Prüfkörpers [mm].

Bei Prüfkörperverformungen ( $\varepsilon > 2 \%$ ) wird anstelle der technischen Verzerrung  $\varepsilon_t$  die natürliche oder auch wahre (logarithmische) Verzerrung  $\varepsilon_{\ln}$  verwendet, die sich als das Integral des Quotienten aus der momentanen (infinitesimalen) Änderung der Prüfkörperlänge  $dl$  und der momentanen (aktuellen) Länge  $l$  berechnet:

$$\varepsilon_{\ln} = \left| \int_{l_0}^l \frac{dl}{l} \right| \cdot 100 \% = \left| \ln \frac{l}{l_0} \right| \cdot 100 \% = |\ln(1 - \varepsilon_t)| \cdot 100 \% \quad (3.3)$$

mit  $\varepsilon_{\ln}$  = wahre (logarithmische) Verzerrung [%],  $l$  = aktuelle Länge des (beanspruchten) Prüfkörpers =  $l_0 - \Delta l$  [mm] und  $l_0$  = Länge des unbeanspruchten Prüfkörpers [mm].

Der aufgebrachte Axialdruck wird aus dem messtechnisch ermittelten Hydraulikdruck im Prüfsylinder unter Berücksichtigung der Querschnittsflächen-Verhältnisse zwischen dem Druckkolben des Hydraulikzylinders und dem Prüfkörper gemäß Gleichung (3.4) berechnet:

$$P_p = P_K \cdot \frac{A_K}{A_p} \quad (3.4)$$

mit  $P_p$  = Axialdruck auf Prüfkörper [MPa],  $P_K$  = Axialdruck im Hydraulikzylinder [MPa],  $A_K$  = Querschnittsfläche des Druckkolbens (Hydraulikzylinder) [mm<sup>2</sup>] und  $A_p$  = Querschnittsfläche des Prüfkörpers [mm<sup>2</sup>].

Für die Auswertung werden sowohl die unkorrigierte Spannungs-Verzerrungs-Kurve mit  $\varepsilon_{1u}$  entsprechend Gleichung (3.3) wie auch eine korrigierte Spannungs-Verzerrungs-Kurve aufgetragen. Für die unkorrigierte Spannung folgt:

$$\sigma_{1u} = \frac{F_1}{A_0} \quad \text{mit} \quad A_0 = \frac{\pi \cdot d_0^2}{4} \quad (3.5)$$

Zur Ermittlung der korrigierten Spannung kann eine lineare oder logarithmische Korrektur der sich mit der Stauchung  $\Delta l$  ändernden Querschnittsfläche  $A$  der Prüfkörper entsprechend Gl. (3.6) oder Gl. (3.7) erfolgen:

$$\sigma_{1uc} = \frac{F_1}{A} \quad \text{mit} \quad A = \frac{A_0}{\varepsilon_t} \quad (3.6)$$

$$\sigma_{1uc-\ln} = \frac{F_1}{A} \quad \text{mit} \quad A = \frac{A_0}{\varepsilon_{\ln}} \quad (3.7)$$

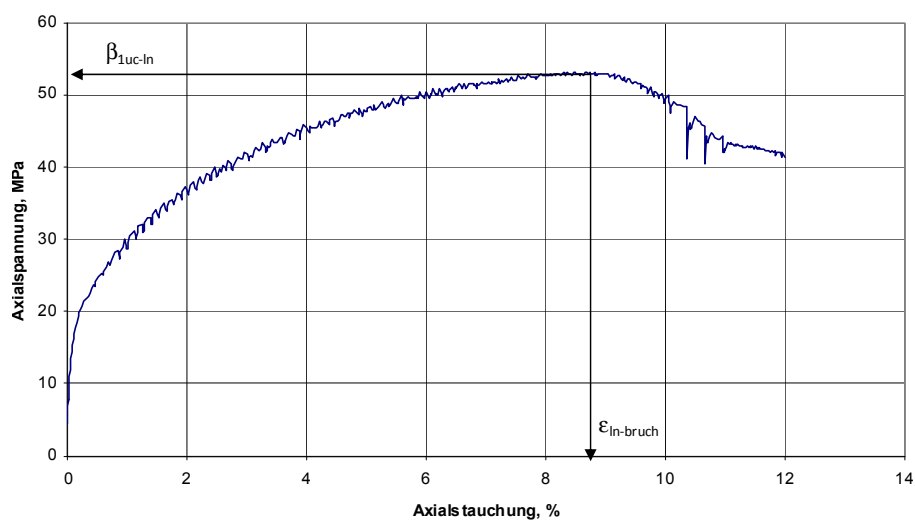
mit  $\sigma_{1uc}$  = linear korrigierte Vertikalspannung [MPa],  $\sigma_{1uc-\ln}$  = logarithmisch korrigierte Vertikalspannung [MPa],  $F_1$  = Vertikalkraft [MN],  $A$  = Querschnittsfläche des beanspruchten Prüfkörpers [m<sup>2</sup>],  $A_0$  = Querschnittsfläche des unbeanspruchten Prüfkörpers [m<sup>2</sup>],  $l_0$  = Länge des unbeanspruchten Prüfkörpers [m],  $\varepsilon_t$  = technische Verzerrung [1] und  $\varepsilon_{\ln}$  = wahre (logarithmische) Verzerrung [1].

Dem Spannungs-Verzerrungs-Diagramm können die jeweilige Bruchfestigkeit  $\sigma_{1uc-\ln}$  (= Höchstwert der Vertikalspannung bzw. der Deviatorspannung) sowie die Bruchverzerrung  $\varepsilon_{\ln-\text{Bruch}}$  entnommen werden.

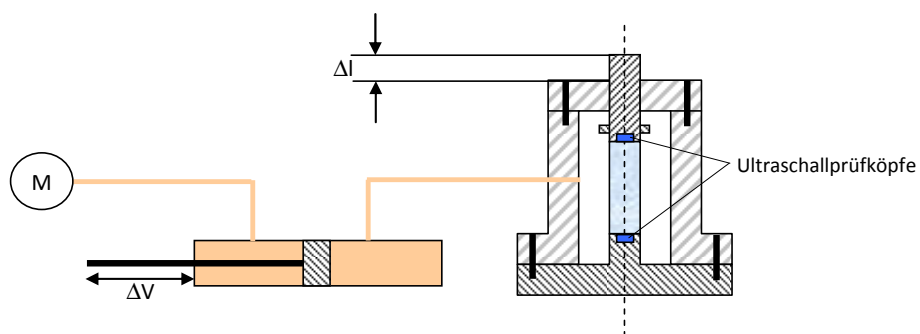
Als Kurzzeitfestigkeit  $\beta_{1uc-\ln}$  wird entsprechend Abb. 3.13 der Spannungszustand definiert, bei dem während des Versuchs eine makrorissbedingte lokale Zerstörung im Prüfkörper mit der Folge einer deutlichen Lastabnahme eintritt. Die zu diesem Span-

nungswert korrespondierende Stauchung wird bei TC-Versuchen als Bruchstauchung  $\varepsilon_{Bruch}^-$  und bei TE-Versuchen als Bruchdehnung  $\varepsilon_{Bruch}^+$  bezeichnet.

Über die klassische Messung von Axialdruck, Manteldruck, Axialverformung und Temperatur hinaus wurden die Volumenänderung der Prüfkörper während des Versuchs sowie die Änderung der Ultraschallwellenlaufzeiten messtechnisch bestimmt. Zur Erfassung der Volumenänderung wird entsprechend Abb. 3.14 neben der induktiven Messung der axialen Prüfkörperdeformation  $\Delta l$  die volumetrische Änderung des Ölvolumens in der Triaxialzelle ermittelt.



**Abb. 3.13** Definition von Kurzzeitbruchfestigkeit und Bruchstauchung bei TC-Versuchen



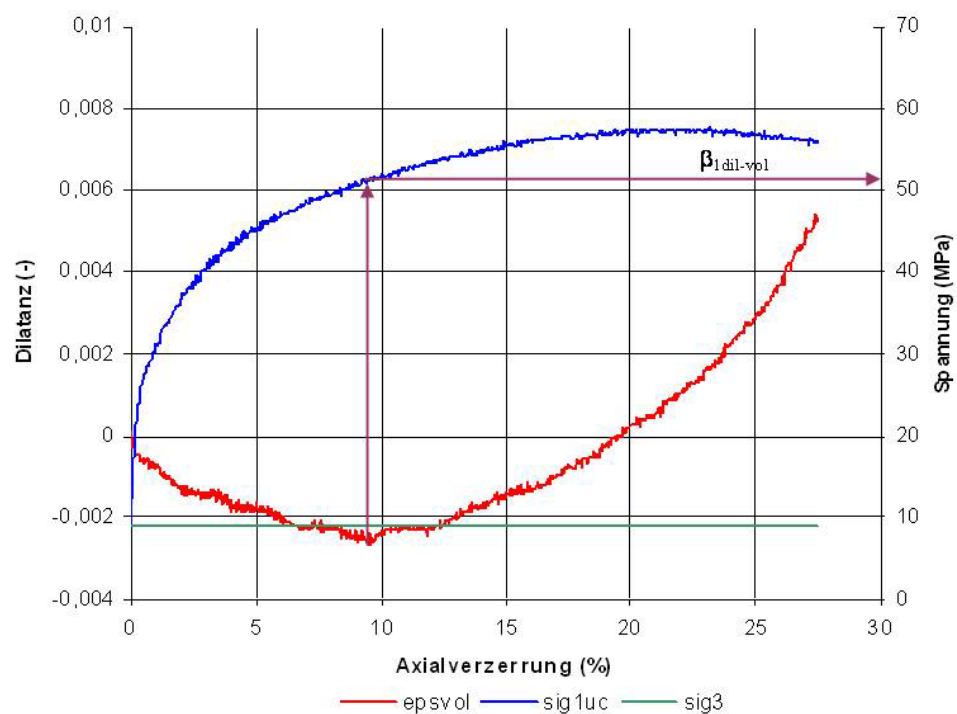
**Abb. 3.14** Prinzipskizze der Dilatanz- und Ultraschallwellenmessung

Das während des Versuchs in der Triaxialzelle verdrängte Ölvolumen  $\pm \Delta V$  wird über einen Gleichgangzylinder geführt. Dabei entspricht 1 mm Verfahrweg des Kolbens im



Messzylinder einem konstruktiv definierten Volumen von 2,6 ml. Bei einer Messgenauigkeit der am Kolben des Gleichgangzylinders angeschlagenen Wegmessung von 1/100 mm können mit dem skizzierten System für 60 mm x 120 mm große Prüfkörper Volumenänderungen in der Größenordnung von 0,0077 % des Prüfkörpervolumens erfasst werden.

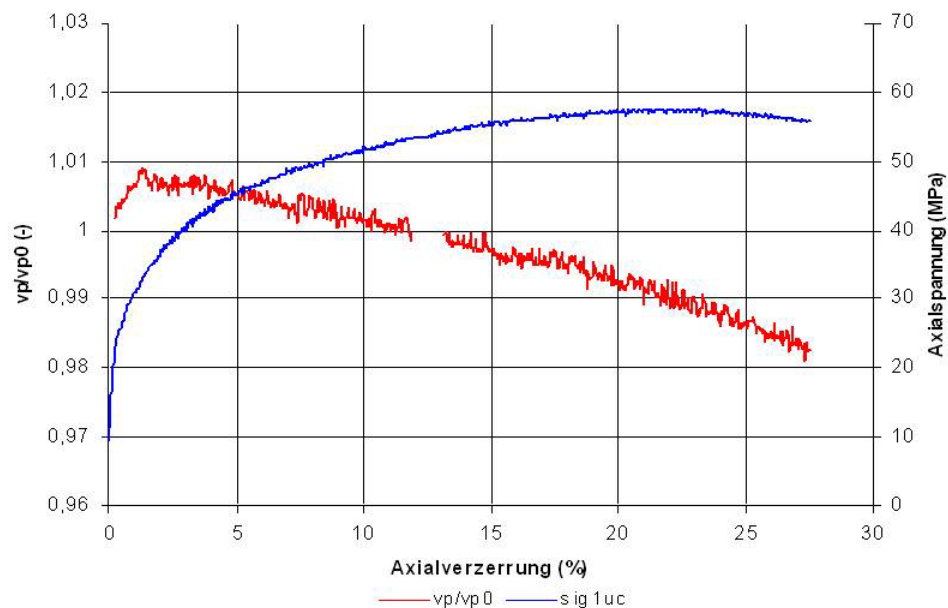
Die auf der Grundlage der Volumenänderung festgelegte Dilatanzfestigkeit  $\varepsilon_{1dil-vol}$  kennzeichnet entsprechend Abb. 3.15 diejenige Axialspannung, bei der die volumetrische Prüfkörperdeformation ein Minimum aufweist (nach Überschreiten von  $\min \varepsilon_{vol}$  überwiegen dilatante Deformationen).



**Abb. 3.15** Festlegung der Dilatanzfestigkeit auf der Grundlage der Volumenverzerrung

Zur weiteren Präzisierung der Dilatanzfestigkeit sind entsprechend Abb. 3.14 in die kopf- und fußseitigen Druckstücke Ultraschallprüfköpfe integriert. Die kontinuierliche Durchschallung der Prüfköpfe während des Versuchs mit messtechnischer Aufzeichnung der Schallwellenlaufzeiten ermöglicht eine von der Volumenmessung unabhängige Festlegung der Dilatanzfestigkeit als demjenigen Beanspruchungsniveau, bei dem in Folge der beginnenden Ausbildung von Materialschädigungen (Mikrofissuren) eine Reduktion der Schallwellenlaufzeiten beobachtet wird. Ein typisches Beispiel für die

Festlegung der Dilatanzfestigkeit auf Basis der Ultraschallwellenlaufzeiten zeigt Abb. 3.16. Deutlich zu erkennen ist, dass das Verhältnis zwischen der aktuellen Schallwellenlaufzeit  $v_p$  und der Schallwellenlaufzeit unter isotroper Beanspruchung zu Beginn des TC-Versuchs  $v_{p0}$  zunächst ansteigt (kontraktante Versuchsphase, Verdichtung des Prüfkörpers) und bei fortgesetzter Prüfkörperbelastung in Folge der Ausbildung von Mikrofissuren beginnt kontinuierlich abzunehmen. Als Dilatanzfestigkeit  $\varepsilon_{1dil-vp}$  wird diejenige Axialspannung bezeichnet, bei der das Verhältnis  $v_p/v_{p0}$  ein Maximum erreicht.



**Abb. 3.16** Definition der Dilatanzfestigkeit auf der Grundlage der Ultraschallwellenlaufzeiten

### 3.4.3 Ergebnisse der Kurzzeitversuche

#### 3.4.3.1 Prüfkörper von der GRS und der TUC mit Herstellung durch Aufsättigung

Insgesamt sind von der GRS 17 und von der TUC 45 Prüfkörper durch Aufsättigung hergestellt worden. Die GRS hat ihre Prüfkörper mit den Namen „PK“, der Abkürzung für Prüfkörper, und einer laufenden Nummer versehen (PK1 bis PK17). Durch die ursprünglich nicht geplante Prüfkörperherstellung in Clausthal wurden diese Prüfkörper von der GRS umbenannt, um eine einheitliche Bezeichnung zu erhalten. Als Bezeich-

nung wird die Abkürzung SVV mit einer laufenden dreistelligen Ziffernfolge versehen, wobei diese für die Prüfkörper von der GRS bei 001 beginnt, während für die Prüfkörper der TUC die laufenden Nummern ab 101 verwendet werden. An 23 Prüfkörpern der TUC und 10 Prüfkörpern der GRS sind Festigkeitsversuche mit variierendem Manteldruck von 1 bis 13 MPa durchgeführt worden. Ein Überblick zu den untersuchten Prüfkörpern gibt Tab. 3.5.

**Tab. 3.5** Übersicht über die von der GRS und der TUC durch künstliche Flutung hergestellten Prüfkörper

| Name           | Nr. | Herst. | Bemerkungen                | Messdatum  |
|----------------|-----|--------|----------------------------|------------|
| PK1 / SVV 001  | 1   | GRS    | Verhältnis h / d 1:1,5     | 18.01.2006 |
| PK2 / SVV 002  | 2   | GRS    | Verhältnis h / d 1:1,5     | 18.01.2006 |
| PK3 / SVV 003  | 3   | GRS    | beprobt                    | 24.01.2007 |
| PK4 / SVV 004  | 4   | GRS    | kaputt                     | -          |
| PK5 / SVV 005  | 5   | GRS    | kleiner Prüfkörper         | -          |
| PK6 / SVV 006  | 6   | GRS    | beprobt                    | 15.01.2007 |
| PK7 / SVV 007  | 7   | GRS    | beprobt                    | 16.01.2007 |
| PK8 / SVV 008  | 8   | GRS    | kleiner Prüfkörper         | -          |
| PK9 / SVV 009  | 9   | GRS    | beprobt                    | 23.01.2007 |
| PK10 / SVV 010 | 10  | GRS    | beprobt                    | 17.01.2007 |
| PK11 / SVV 011 | 11  | GRS    | kleiner Prüfkörper         | -          |
| PK12 / SVV 012 | 12  | GRS    | beprobt                    | 22.01.2007 |
| PK13 / SVV 013 | 13  | GRS    | beim Auspressen zerbrochen | -          |
| PK14 / SVV 014 | 14  | GRS    | beprobt                    | 18.01.2007 |
| PK15 / SVV 015 | 15  | GRS    | beim Auspressen zerbrochen | -          |
| PK16 / SVV 016 | 16  | GRS    | beprobt                    | 19.01.2007 |
| PK17 / SVV 017 | 17  | GRS    | kleiner Prüfkörper         | -          |
| SVV 101        | 101 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 102        | 102 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 103        | 103 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 104        | 104 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 106        | 106 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 107        | 107 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 108        | 108 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 109        | 109 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 111        | 111 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 112        | 112 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 113        | 113 | TUC    | kavernös                   | -          |
| SVV 114        | 114 | TUC    | beprobt                    | 23.05.2007 |
| SVV 115        | 115 | TUC    | beprobt                    | 23.05.2007 |
| SVV 116        | 116 | TUC    | beprobt                    | 24.05.2007 |
| SVV 117        | 117 | TUC    | beprobt                    | 25.05.2007 |
| SVV 118        | 118 | TUC    | beprobt                    | 06.06.2007 |
| SVV 119        | 119 | TUC    | beprobt                    | 07.06.2007 |
| SVV 121        | 121 | TUC    | beprobt                    | 08.06.2007 |
| SVV 122        | 122 | TUC    | beprobt                    | 11.06.2007 |

**Tab. 3.5** Übersicht über die von der GRS und der TUC durch künstliche Flutung hergestellten Prüfkörper [Fortsetzung]

| Name    | Nr. | Herst. | Bemerkungen          | Messdatum  |
|---------|-----|--------|----------------------|------------|
| SVV 123 | 123 | TUC    | beprobt              | 12.06.2007 |
| SVV 124 | 124 | TUC    | beprobt              | 13.06.2007 |
| SVV 125 | 125 | TUC    | beprobt              | 14.06.2007 |
| SVV 126 | 126 | TUC    | beprobt              | 18.06.2007 |
| SVV 127 | 127 | TUC    | defekt               | -          |
| SVV 128 | 128 | TUC    | beprobt              | 19.06.2007 |
| SVV 129 | 129 | TUC    | Leerlaufdeformation  | 14.06.2007 |
| SVV 131 | 131 | TUC    | beprobt              | 14.05.2007 |
| SVV 132 | 132 | TUC    | beprobt              | 14.05.2007 |
| SVV 133 | 133 | TUC    | beprobt              | 14.05.2007 |
| SVV 134 | 134 | TUC    | beprobt              | 16.05.2007 |
| SVV 135 | 135 | TUC    | beprobt              | 16.05.2007 |
| SVV 136 | 136 | TUC    | beprobt              | 16.05.2007 |
| SVV 137 | 137 | TUC    | beprobt              | 18.05.2007 |
| SVV 138 | 138 | TUC    | beprobt              | 21.05.2007 |
| SVV 139 | 139 | TUC    | beprobt              | 22.05.2007 |
| SVV 141 | 141 | TUC    | noch nicht abgedreht | -          |
| SVV 142 | 142 | TUC    | noch nicht abgedreht | -          |
| SVV 143 | 143 | TUC    | noch nicht abgedreht | -          |
| SVV 144 | 144 | TUC    | noch nicht abgedreht | -          |
| SVV 145 | 145 | TUC    | noch nicht abgedreht | -          |
| SVV 146 | 146 | TUC    | noch nicht abgedreht | -          |
| SVV 147 | 147 | TUC    | noch nicht abgedreht | -          |
| SVV 148 | 148 | TUC    | noch nicht abgedreht | -          |
| SVV 149 | 149 | TUC    | noch nicht abgedreht | -          |

Bei der Prüfkörperherstellung und Prüfkörperpräparation sowie im Zusammenhang mit den Triaxialversuchen werden folgende Parameter gemessen:

Prüfkörperherstellung / Prüfkörperpräparation:

- Alter [d]
- Masse Prüfkörper [g]
- Porosität [%]\*\*
- Durchmesser [mm]
- Länge [mm]
- E (dynamisch) [MPa]
- $\nu$  (dynamisch) [1]
- Dichte\* [kg / dm<sup>3</sup>]

Triaxialversuch / während:

- Manteldruck [MPa]
- Spitzenfestigkeit [MPa]
- Verformung (Bruch) [%]
- Dilatanzfestigkeit [MPa]
- Dilatanzverformung (vol) [%]
- Verformungsrate\* [%/min]

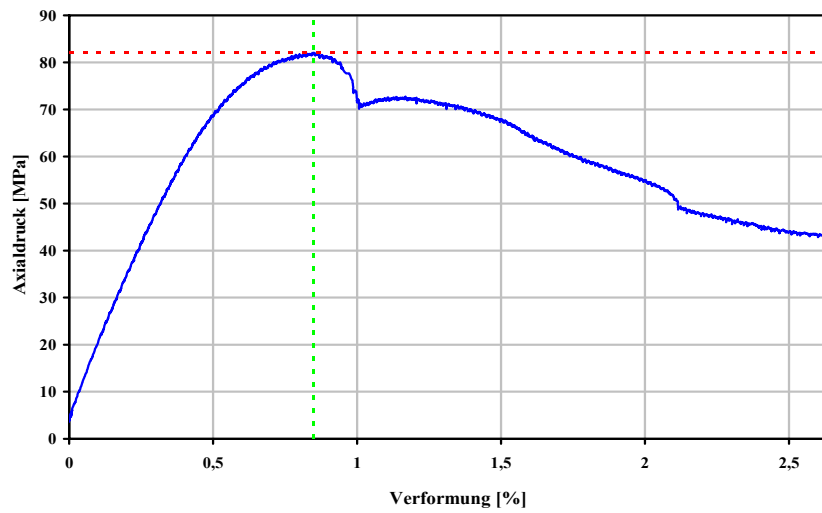
Triaxialversuch / nach dem Versuch:

- Restfeuchte\* [%]
- Masse mit Lösung [g]
- Masse trocken [g]

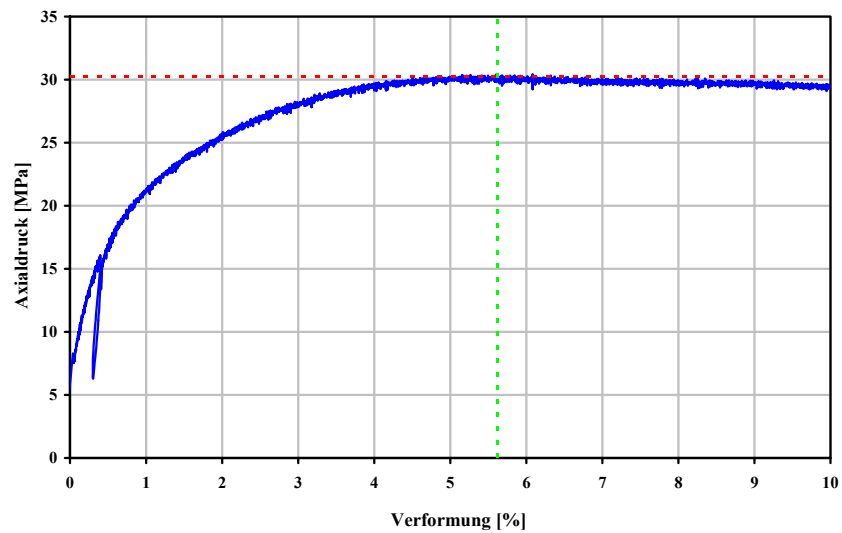
\* abgeleitete Größen

\*\* nur exemplarisch gemessen

In Abb. 3.17 und Abb. 3.18 sind die Spannungsverzerrungskurven des Prüfkörpers SVV002 und des Prüfkörpers SVV003 exemplarisch dargestellt und in Abb. 3.19 die fotografische Darstellung der beiden Prüfkörper. Der Prüfkörper SVV002 zeichnet sich durch eine relativ hohe Spitzenfestigkeit und eine geringe Verformbarkeit aus und verhält sich damit unter den gewählten Beanspruchungsbedingungen im Grundsatz wie ein elastisch-sprödes Material. Der Prüfkörper SVV003 hat dagegen eine mittlere Spitzenfestigkeit und eine relativ große Verformbarkeit, zeigt in seinen mechanischen Eigenschaften also einen eher duktilen Charakter ähnlich wie Steinsalz. Trotz gleicher Herstellungs- und Versuchsbedingungen weisen diese beiden Prüfkörper damit ein deutlich unterschiedliches Materialverhalten auf.



**Abb. 3.17** Spannungsverzerrungskurve von Prüfkörper SVV002



**Abb. 3.18** Spannungsverzerrungsverhalten von Prüfkörper SVV003

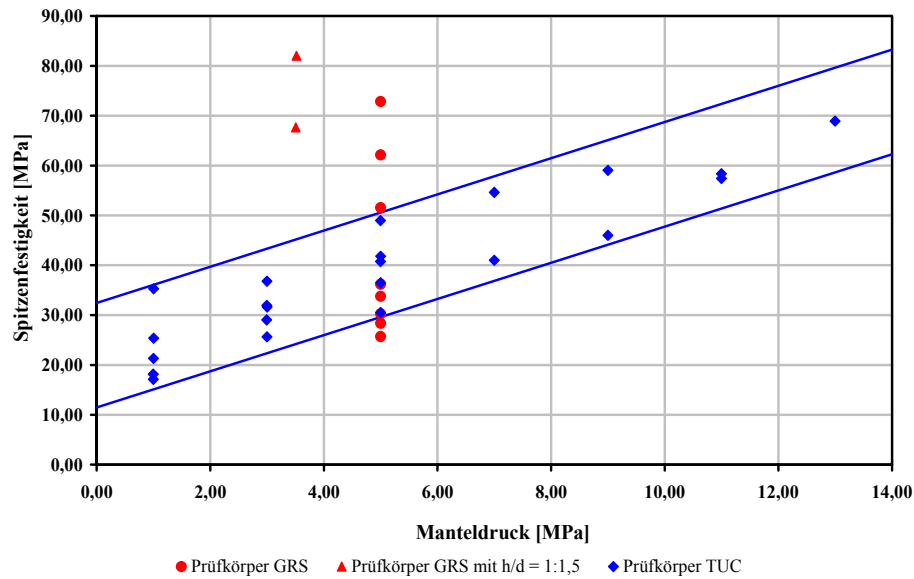


**Abb. 3.19** Prüfkörper SVV002 (links), mit sprödem und Prüfkörper SVV003 (rechts) mit duktilem Materialverhalten vor den Triaxialversuchen

Anm.: Das Verhältnis von  $l/d = 1,5$  führt zu einer etwas höheren Spitzenfestigkeit, ändert jedoch das grundsätzliche Materialverhalten nicht.

Ein Vergleich aller gemessenen Spitzenfestigkeiten sowohl von der GRS – wie auch TUC-Prüfkörpern in Abhängigkeit des Manteldrucks ist in Abb. 3.20 zu sehen. Bei einem Manteldruck von  $\sigma_{2,3} = 5 \text{ MPa}$ <sup>2</sup> schwankt die Spitzenfestigkeit zwischen  $\beta_1 = 30$  und 49 MPa (TUC) bzw.  $\beta_1 = 28$  und 73 MPa (GRS). Für ein künstlich hergestelltes Material sind diese Schwankungen als beträchtlich anzusehen. Bei Betrachtung der TUC-Prüfkörper ist die Streubreite allerdings signifikant geringer – zurückzuführen wohl auf das Herstellverfahren. Eine Abhängigkeit der Spitzenfestigkeit vom Manteldruck ist bei den Prüfkörpern von der TUC ebenfalls deutlich erkennbar. Allerdings zeigt sich auch, dass die im Aufsättigungsprozess bei der GRS hergestellten Prüfkörper Spitzenfestigkeiten erreichen, die etwa mindestens an der Untergrenze des Streubreitenbandes der TUC-Prüfkörper liegen, teilweise aber auch deutlich größere Festigkeiten aufweisen als die TUC-Prüfkörper.

<sup>2</sup>  $\sigma_{2,3}$  ist eine Kurzschreibweise für den Radialdruck bzw. Ringraumdruck in Triaxialversuchen mit zylindrischen Prüfkörpern, die zusätzlich indiziert, dass dieser Druck identisch sowohl in  $\sigma_2$ - als auch in  $\sigma_3$ -Richtung anliegt.



**Abb. 3.20** Gemessenen Spitzenfestigkeiten der Prüfkörper von der GRS und der TUC

Auch die in Abb. 3.20 aufgetragenen Bruchverformungen schwanken mit Werten von  $\varepsilon_{1f}^- = 1,3$  bis  $8,9$  % (TUC) bzw.  $\varepsilon_{1f}^- = 1,1$  bis  $9,3$  % (GRS) bei  $\sigma_{2,3} = 5$  MPa Manteldruck enorm. Deutlich ist bei den TUC-Prüfkörpern eine Zunahme der Bruchverformung mit zunehmendem Manteldruck erkennbar. Werden nur die Versuche der TUC betrachtet, so könnte die Hypothese aufgestellt werden, dass es sich bei den Prüfkörpern mit einer Bruchverformung von  $\varepsilon_{1f}^- > 8$  % (SVV118, SVV128 und SVV139) um Prüfkörper mit einer kavernen Matrix handelt. Dem widersprechen jedoch die optische Begutachtung der Prüfkörper und mehrere Parameter wie die Prüfkörpermasse, die Dichte, der dynamische E-Modul und die Poissonzahl (dynamisch), die nicht aus dem Rahmen der anderen Messwerte fallen. Die Ursache für diese ausgeprägte Deformationsfestigkeit ist makroskopisch nicht erkennbar. Ob unterschiedliche Mineralphasenbestände zu diesem unterschiedlichen mechanischen Verhalten führen, bleibt zu prüfen.

Die Minimal- und Maximalwerte der verschiedenen physikalischen und insbesondere mechanischen Parameter der durch Aufsättigung hergestellten Prüfkörper sind in Tab. 3.6 dargestellt, jeweils getrennt für die Prüfkörper der TUC und der GRS. Die Gegenüberstellung der Zahlenwerte zeigt, dass die Wertebereiche der Prüfkörper der TUC und der GRS in etwa gleich sind. Lediglich bei der Dichte zeigen die Prüfkörper von der TUC einen höheren Minimalwert, sodass ihre Dichte um ca. 3 % größer ist als die Dichte der Prüfkörper von der GRS. Durch die Anfangsmasse SVV kann dieser Effekt



jedoch nicht hervorgerufen sein, da die ersten beiden Prüfkörperchargen mit üblicher Startmasse SVV hergestellt wurden und in der dritten Charge für drei Prüfkörper sogar weniger SVV verwendet worden ist (Kap. 3.3.2). Insgesamt betrachtet sind bei den meisten Parametern die Schwankungen beträchtlich, z. B. bei der Porosität, dem E-Modul (dynamisch), der Spitzenfestigkeit und der Verformung.

**Tab. 3.6** Minimal- und Maximalwerte verschiedener Parameter der Prüfkörper von der GRS und der TUC

| Parameter           | TUC         | GRS         | Einheit                 |
|---------------------|-------------|-------------|-------------------------|
| Porosität           | 7,1 - 10,3* | 6,2 - 15,6  | [%]                     |
| E-Modul (dynamisch) | 10,8 - 29,6 | 13 - 32     | [MPa]                   |
| $\nu$ (dynamisch)   | 0,27 - 0,41 | 0,26 - 0,34 | [ ]                     |
| Dichte              | 1,95 - 2,08 | 1,80 - 2,04 | [kg / dm <sup>3</sup> ] |
| Spitzenfestigkeit   | 17 - 69     | 25 - 73     | [MPa]                   |
| Verformung (Bruch)  | 0,7 - 11,0  | 0,7 - 9,3   | [%]                     |
| Restfeuchte         | 10,4 - 14,4 | 10,7 - 16,2 | [%]                     |

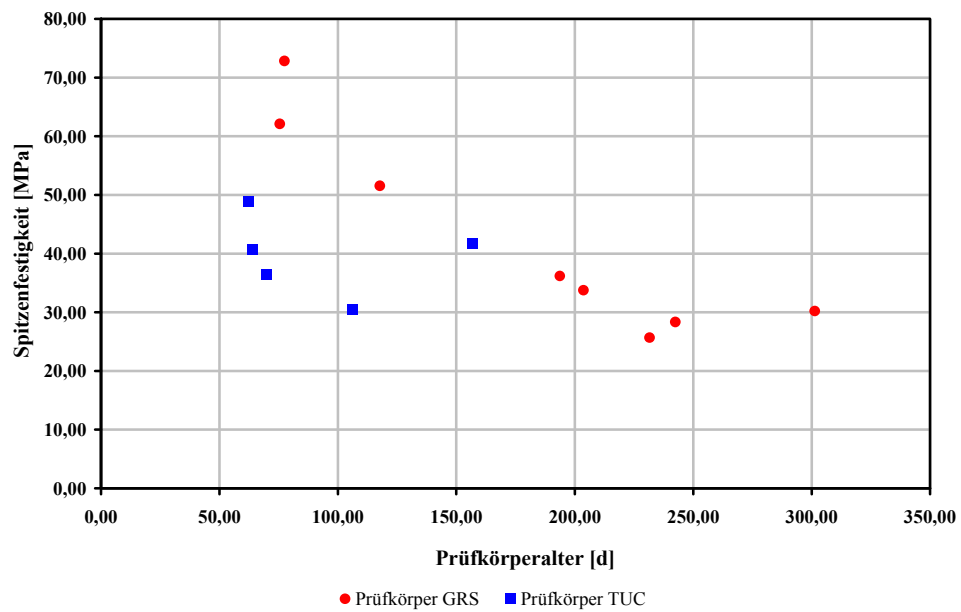
\* nur drei Messwerte

Die Materialschwankungen sind so groß, dass ein Stoffmodell diese Realität nur sehr begrenzt wiedergeben kann. Für eine ingenieurtechnische Interpretation der Messdaten müsste von den nachweisbezogenen, jeweils ungünstigsten, Zahlenwerten ausgegangen werden. Insgesamt hat die Optimierung der Prüfkörperherstellung zwar einerseits zu nicht mehr durch ein kavernoöses Gefüge geprägten Prüfkörpern geführt, konnte andererseits jedoch die Streubreite nicht ausreichend verringern. Mögliche Ursache hierfür könnten die in Kap. 3.3.1 erwähnten chemischen Reaktionen sein, die erst im Lauf der Zeit auftreten. Ob solche Reaktionen stattfinden und ob sich in Folge die mechanischen Eigenschaften der Prüfkörper aufgrund von chemischen Prozessen im Lauf der Zeit noch weiter verändern, sollte untersucht werden. Insbesondere sollte begutachtet werden, ob sich die Streubreiten noch weiter vergrößern.

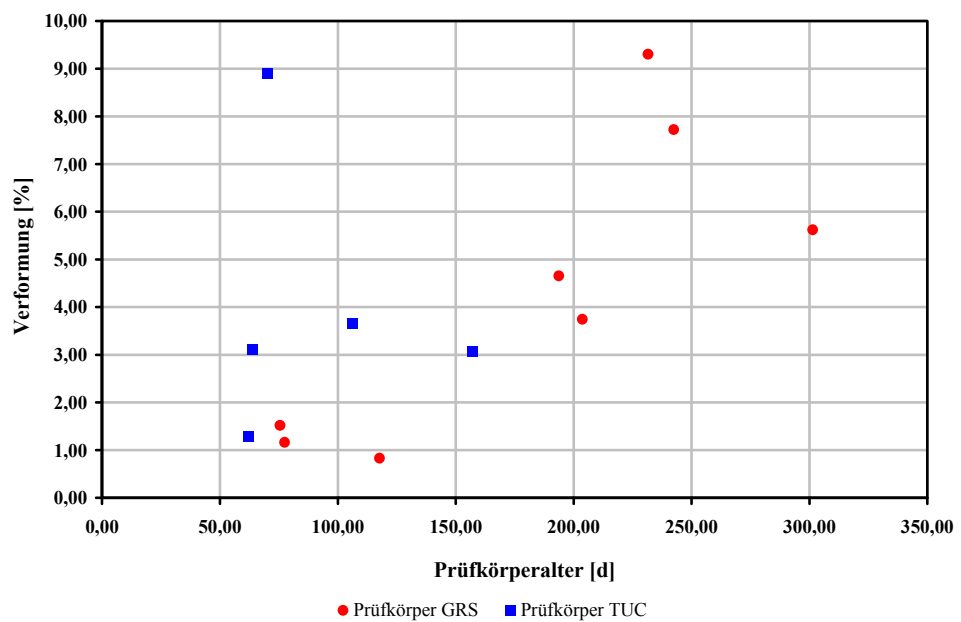
Aufgrund der mitunter schlechten mechanischen Qualität der GRS-Prüfkörper wurde beschlossen, dass an diesen Prüfkörpern untersucht werden soll, ob nach der ersten Aushärtungsphase von etwa 14 Tagen noch eine weitere Aushärtung stattfindet. Daher wurden diese Prüfkörper zwischengelagert, sodass Proben mit verschiedenem Alter für weitere Versuche zur Verfügung stehen. In Abb. 3.21 und Abb. 3.22 sind die Ergebnisse dieser Untersuchungen dargestellt. Um die Versuchsergebnisse direkt vergleichen zu können, waren die Versuchsrandbedingungen (Manteldruck  $\sigma_{2,3} = 5$  MPa, Verformungsrate  $\dot{\varepsilon}_{1f}^- = 0,025$  %/min) bei diesen Versuchen identisch. Zu den Ergebnissen

mit Prüfkörpern der GRS sind auch Ergebnisse mit Prüfkörpern der TUC ergänzend dargestellt und zeitbezogen zugeordnet. Während die Prüfkörper der TUC in der Tendenz bei noch begrenztem Untersuchungszeitraum eher keine zeitliche Veränderung der Spitzenfestigkeit oder der Verformbarkeit aufzeigen, ist bei den Prüfkörpern von der GRS erkennbar, dass sie entgegen der Erwartung und eher überraschend, aber tendenziell eindeutig mit zunehmendem Alter eine geringere Spitzenfestigkeit aufweisen und eine höhere Verformbarkeit.

Als Dilatanzfestigkeit wird das Beanspruchungsniveau angesehen, das ein Gestein gerade ohne die Ausbildung von Gefügeschädigungen ertragen kann (hier zunächst bezogen auf den Kurzzeitversuch). Üblicherweise ist dieser Beanspruchungszustand dann erreicht, wenn das Material maximal kompaktiert ist. Vorher sind noch Mikroporenräume geöffnet. Nach Überschreiten eines Beanspruchungsniveaus, das als Schädigungs- bzw. Dilatanzgrenze bezeichnet wird, entstehen bei weiterer Belastungserhöhung zunehmend Mikrofissuren, die als Schädigungen des Gesteinsgefüges anzusehen sind. Um die Intensität dieser Schädigungen messtechnisch zu erfassen, wird zum einen die Volumenänderung gemessen, zum anderen die Änderung der Ultraschallwellenlaufgeschwindigkeit. Die Erfahrung zeigt, dass auf die SVV-Prüfkörper diese beiden in Kap. 3.4.2 erläuterten Messmethoden zur Ermittlung der Schädigungs- bzw. Dilatanzgrenze nicht angewendet werden können. Unter anderem ist bei beiden Verfahren beobachtet worden, dass die Dilatanzgrenze erst im Nachbruchbereich auftritt. Aus diesem Grund werden die ermittelten Dilatanzfestigkeiten nicht dargestellt. Die Ursachen sind zu untersuchen.



**Abb. 3.21** Gemessene Spitzenfestigkeiten der Prüfkörper der GRS und der TUC bei 5 MPa Manteldruck in Abhängigkeit von ihrem Alter



**Abb. 3.22** Gemessene Bruchverformungen der Prüfkörper von der GRS und der TUC bei 5 MPa Manteldruck in Abhängigkeit von ihrem Alter

### 3.4.3.2 Prüfkörper der TUC mit Herstellung durch Anmischen

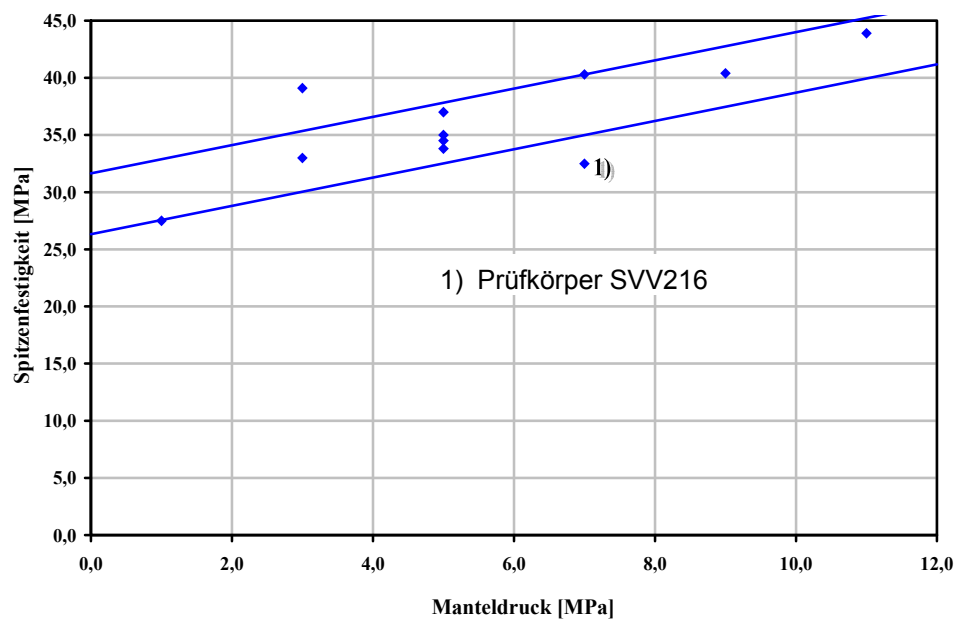
Die durch druckforcierte Aufsättigung hergestellten Prüfkörper unterliegen sehr großen Materialschwankungen, die aller Wahrscheinlichkeit nach auf individuell ausgebildete Inhomogenitäten im Gefüge und in den Mineralphasen beruhen. Diese Inhomogenitäten und damit die Materialschwankungen sollen durch das laufende Anmischen des SVV reduziert werden, da bei diesem Verfahren schon zu Beginn der Aushärtung eine relativ homogene Verteilung von Lösung und SVV vorliegt. Eine visuelle Bemusterung zeigt, dass die durch Anmischen hergestellten Prüfkörper homogen erscheinen (siehe Abb. 3.9). Da die ersten drei Triaxialversuche bei einem Manteldruck von  $\sigma_{2,3} = 5,0$  MPa mit einer Spitzenfestigkeit von  $\beta = 34 - 37$  MPa Resultate mit deutlich geringerer Streubreite lieferten, sind weitere Versuche mit variiertem Manteldruck gefahren worden. Das Resultat dieser Versuche ist in Abb. 3.23 dargestellt. Abgesehen von Prüfkörper SVV210 mit einer Spitzenfestigkeit von  $\beta = 39$  MPa bei  $\sigma_{2,3} = 3,0$  MPa Manteldruck und Prüfkörper SVV216 mit einer Spitzenfestigkeit von  $\beta = 33$  MPa bei  $\sigma_{2,3} = 7,0$  MPa Manteldruck ist ein enger systematischer Zusammenhang zwischen zunehmendem Manteldruck und zunehmender Spitzenfestigkeit deutlich zu erkennen. Die zu geringe Spitzenfestigkeit von Prüfkörper SVV216 (in Abb. 3.23 mit <sup>1)</sup> gekennzeichnet) resultiert aller Wahrscheinlichkeit nach in der Herstellung, denn im Gegensatz zu den anderen Prüfkörpern kam es hier bei der Herstellung zu einer größeren Wärmeentwicklung als üblich, wodurch die Lösung nach dem Durchmischen stark zu kochen anfang. Die Dichte von Prüfkörper SVV210 ist mit  $\rho = 1,82$  kg/dm<sup>3</sup> im Vergleich zu den anderen Prüfkörpern mit Dichten von  $\rho = 1,69 - 1,83$  kg/dm<sup>3</sup> relativ hoch, genau wie der dynamische E-Modul mit  $E_{dyn} = 14,9$  GPa im Vergleich zu  $E_{dyn} = 11,6 - 15,0$  GPa relativ hoch liegt.

Insgesamt zeigt sich, dass das Herstellungsverfahren in die richtige Richtung geht, jedoch noch verfeinert werden sollte. Insgesamt hat sich die Streubreite der mechanischen Parameter im Vergleich zu den Prüfkörpern, die durch Aufsättigung hergestellt wurden, deutlich reduziert.

Bei einem Vergleich zwischen der altersabhängigen Spitzenfestigkeit der Prüfkörper der GRS nach Abb. 3.21 und der Spitzenfestigkeit der angemischten Prüfkörper der TUC nach Abb. 3.23 kann die Hypothese aufgestellt werden, dass die zeitliche Veränderung der Spitzenfestigkeit der aufgesättigten Prüfkörper auf einer Homogenisierung in Form von Kristallwasseraustausch zwischen den Hydraten beruht und sich dadurch die Spitzenfestigkeit der aufgesättigten Prüfkörper im Lauf der Zeit der Spitzenfestig-

keit der angemischten Prüfkörper annähert. Belegbar ist diese Hypothese jedoch noch nicht, da hierfür Untersuchungen an weiteren Prüfkörpern mit einem Alter von mindestens einem Jahr erforderlich werden.

Da die durch Anmischen hergestellten Prüfkörper sich aufgrund der geringeren Streubreiten deutlich besser für ein Verschlussmaterial eignen, wurde in Absprache mit den anderen Projektpartnern beschlossen sämtliche noch benötigten Prüfkörper durch Anmischen herzustellen und ein Stoffmodell für angemischten SVV zu entwickeln.

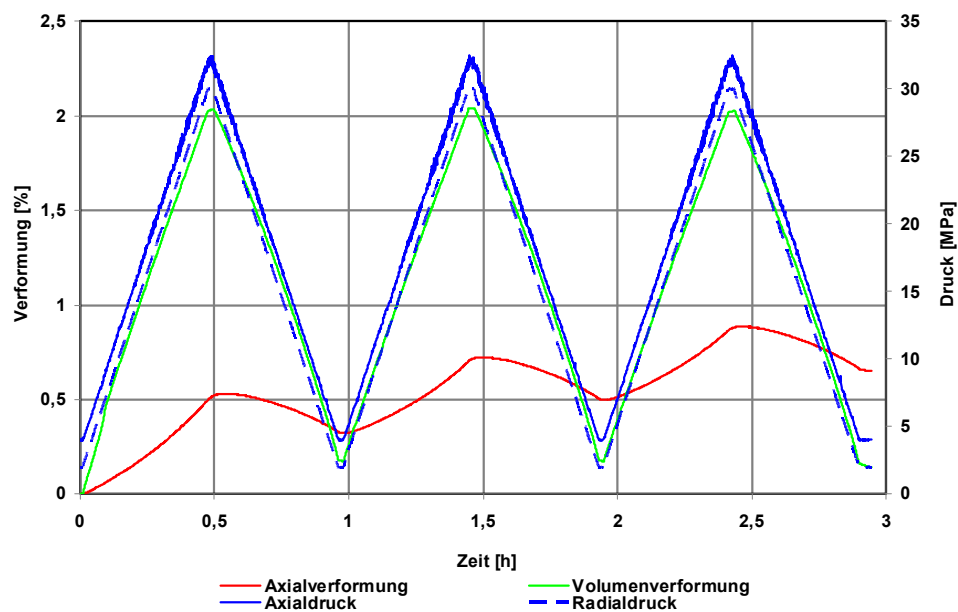


**Abb. 3.23** Spitzenfestigkeit in Abhängigkeit vom Manteldruck der angemischten Prüfkörper

Insgesamt wurden 76 Prüfkörper durch Anmischen hergestellt, die mit den Bezeichnungen SVV201 bis SVV276 versehen wurden. Durch die Optimierung der Herstellungsprozedur (Kap. 3.3.3), waren jedoch viele der Prüfkörper herstellungsbedingt für Versuche nicht geeignet, z. B. weil es aufgrund von starkem Kochen zu Rissen in den Prüfkörper kam oder die Mischung beim Einfüllen nicht gleichmäßig genug war. An diesen Prüfkörpern wurden insgesamt 16 triaxiale Festigkeitsversuche, 5 einaxiale Festigkeitsversuche, 9 einaxiale Kriechversuche, 1 Kompressionsversuch, 3 Kriechversuche und 4 Triaxialpermeationsversuche durchgeführt.

### 3.5 Kompressionsversuche

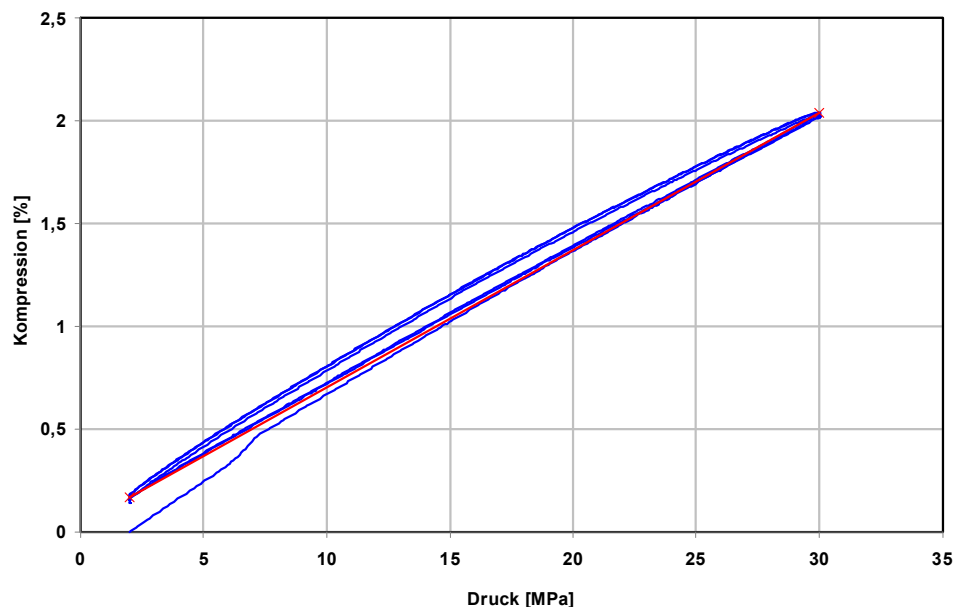
In Kap. 3.4.3 wurden die laborativ ermittelte Bruchfestigkeit, die Dilatanzfestigkeit und die Steifigkeit der angemischten SVV- Prüfkörper dokumentiert. Die in diesem Kapitel behandelten Kompressionsversuche dienen dazu, die (Volumen-) Kompression in Abhängigkeit von der aufgegebenen Belastung zu messen. Hierzu wurde der Prüfkörper in einen Triaxialprüfstand (Beschreibung siehe Kap. 3.4.1) eingebaut und mit einer Beanspruchung von  $\sigma_1 = 3$  MPa (axial) und  $\sigma_{2,3} = 2$  MPa (lateral) belastet. Innerhalb einer halben Stunde wurde die Belastung auf  $\sigma_1 = 32$  MPa axial zu  $\sigma_{2,3} = 30$  MPa radial erhöht und anschließend im Verlauf einer weiteren halben Stunde wieder auf die Ausgangswerte abgesenkt. Diese zyklische und näherungsweise isotrope Belastung wurde mehrfach wiederholt (Abb. 3.24). Dabei wurden die Axial- und die Volumenverformung gemessen.



**Abb. 3.24** Ablauf des Kompressionsversuches SVV272

Der Kompressionsmodul beschreibt, welche isotrope Druckänderung nötig ist, um eine bestimmte Volumenänderung hervorzurufen und berechnet sich aus dem Verhältnis von isotroper Druckänderung zu hervorgerufener Volumenänderung. Dieses Verhältnis kann aus der Spannungs-Verformungskurve bestimmt werden (Abb. 3.25). Im Fall des Prüfkörpers SVV272 ergab sich hierbei ein Zahlenwert von  $K = 1500$  MPa.

Bei der Verwendung des SVV als Bohrlochverschlussmaterial wird das Material vom umgebenden konvergierenden Gebirge belastet und damit zugleich einer monotonen Kompression und Kompaktion ausgesetzt. Bei diesem Vorgang ist allerdings die Kompression von untergeordneter Bedeutung. Hier werden bei einer Lasterhöhung von  $\Delta\sigma_{iso} = 30 \text{ MPa}$  nur Zahlenwerte von  $\varepsilon_{Vol} \approx 1,8 \%$  erreicht, während bei der Kompaktion, entsprechend den Befunden aus den Permeationsmessungen nach Kap. 3.7.1 und den Kriechversuchen nach Kap. 3.6.3 bei  $\Delta\sigma_{iso} = 4 \text{ MPa}$  isostatischer Belastung schon Zahlenwerte von  $\varepsilon_{Vol} \approx 4 \%$  erreicht werden. Aus diesem Grund sind Untersuchungen zum Kompressionsverhalten nicht weiter vertieft worden. Der Fokus ist nunmehr auf das Kompaktionsverhalten gelegt worden.



**Abb. 3.25** Spannungs-Verformungskurve des Kompressionsversuches SVV272

Auch die Beziehung zwischen Porosität und Permeabilität ist nicht aus Kompressionsversuchen, sondern aus Kompaktionsversuchen bestimmt worden, da Kompaktion und Kompression phänomenologisch unterschiedliche Prozesse sind und somit wahrscheinlich auch zu unterschiedlichen Porositäts-Permeabilitäts-Beziehungen führen. Eine detailliertere Beschreibung der Entwicklung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für angemischten SVV ist in Kap. 4.2 zu finden.

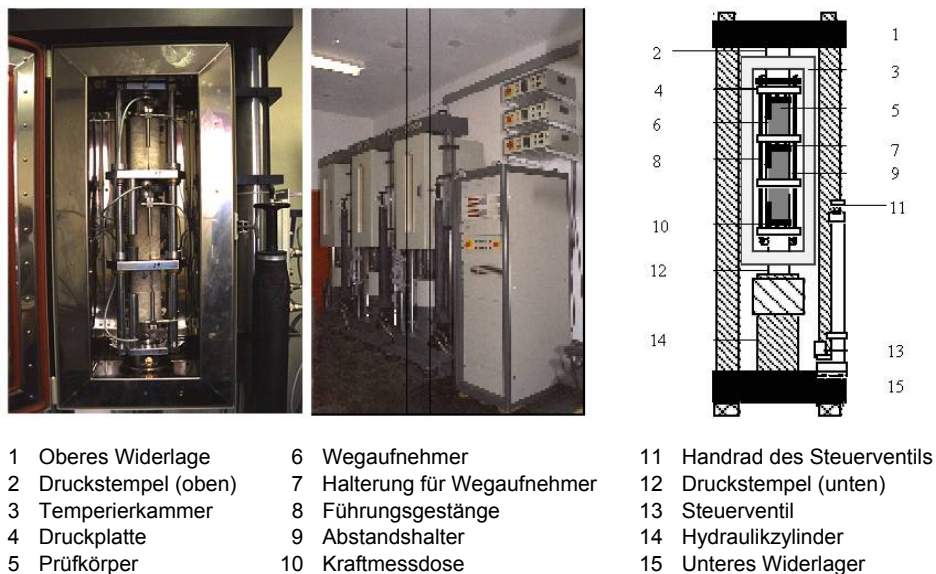
Als Ergebnis dieser Versuche erscheinen zudem Kriechversuche von besonderem Interesse, da der Prüfkörper SVV272 selbst bei der geringen Effektivspannung von  $\sigma_V = 0,5 \text{ MPa}$  entsprechend Abb. 3.24 bereits innerhalb von wenigen Stunden eine zeit-

abhängige axiale Verformung zeigte, jedoch keine zeitabhängige Volumenverformung (Abb. 3.25).

### 3.6 Kriechversuche

#### 3.6.1 Versuchsaufbau und Versuchstechnik

Die Durchführung von Kriech- bzw. Dauerstandversuchen erfolgte sowohl auf den in Abb. 3.26 gezeigten Einaxialprüfständen wie auch auf den in Abb. 3.12 (Seite 55) gezeigten Triaxialprüfanlagen.



**Abb. 3.26** Zeitstandprüfer des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik

Die in Abb. 3.26 dargestellten servohydraulisch geregelten Zeitstandprüfer vom Typ RRP 1000 der Firma Carl Schenk AG ermöglichen die zeitgleiche Untersuchung von bis zu drei zylindrischen Prüfkörpern bei einer Axiallast von maximal  $F = 1000 \text{ kN}$  und Temperaturen von bis zu  $T = 200 \text{ °C}$ . Die messtechnische Überwachung der einaxialen Dauerstandversuche erfolgt rechnergesteuert mittels

- drei Induktivwegaufnehmern, deren Mittelwert als Messwert für die Registrierung der axialen Prüfkörperstauchung herangezogen wurde (3 Induktivwegaufnehmer je Prüfkörper → 9 Induktivwegaufnehmer je Zeitstandprüfer),



- einer Kraftmessdose, die unmittelbar zwischen Prüfkörper und kopfseitiger Druckplatte die Prüfkörperbelastung ermittelt (1 Kraftmessdose je Prüfkörper → 3 Kraftmessdosen je Zeitstandprüfer),
- einem Absolutdruckaufnehmer zur kontinuierlichen Überwachung und Kontrolle des Hydraulikdruckes (1 Absolutdruckaufnehmer je Zeitstandprüfer) sowie
- einem Pt100-Aufnehmer mit nachgeschalteter Temperatursteuerung zur kontinuierlichen Regelung und Überwachung der versuchstechnisch vorgegebenen Temperatur (1 Temperaturlaufnehmer je Zeitstandprüfer).

Die messtechnische Überwachung der triaxialen Kriechversuche erfolgt rechnergesteuert mittels

- drei Induktivwegaufnehmern, deren Mittelwert als Messwert für die Registrierung der axialen Prüfkörperstauchung herangezogen wurde,
- einer Kraftmessdose, die unmittelbar zwischen Triaxialzelle und der unverschiebbar gelagerten Kopfplatte des Belastungsrahmens die axiale Prüfkörperbelastung ermittelt,
- einem Absolutdruckaufnehmer zur kontinuierlichen Messung und Überwachung des Manteldruckes sowie
- einem Pt 100 Aufnehmer zur Kontrolle der vorgegebenen Temperatur.

Um die Prüfkörper gegen ein Eindringen des Druckmediums zu schützen, werden sie vor dem Einbau in die Triaxialzellen mit Gummischläuchen ummantelt. Nach dem Einbau der Prüfkörper in die Triaxialzellen wird zunächst durch wechselseitige Erhöhung von Axiallast und Manteldruck ein isotropes Spannungsniveau entsprechend dem vorgegebenen Manteldruck eingestellt. Anschließend werden die mit Heizmanschetten ummantelten Triaxialzellen über eine automatische Temperaturregelung auf die vorgegebene Temperatur aufgeheizt. Nach einer Standzeit von 24 h unter isotropem Spannungsniveau und bei konstanter Temperatur erfolgt schließlich die deviatorische Laststeigerung.

Um während des gesamten Versuches die Axialspannung konstant zu halten, wird die Axiallast in Abhängigkeit von der verformungsbedingten Änderung des Prüfkörperquerschnitts in regelmäßigen Abständen neu berechnet und über eine halbautomatische Nachregelung des Hydraulikdruckes (Einaxialprüfstände Abb. 3.26) in definierten Zeitintervallen entsprechend Gl. (3.7) nachgeregelt. Dabei gilt:

$$\sigma_{1uc} = \frac{F_1}{A} \text{ mit } A = \frac{A_0}{1 - \varepsilon_t} \quad (3.8)$$

mit  $\sigma_{1uc}$  = linear korrigierte Vertikalspannung [MPa],  $F_1$  = Vertikalkraft [MN],  $A$  = Querschnittsfläche des beanspruchten Prüfkörpers [m<sup>2</sup>],  $A_0$  = Querschnittsfläche des unbeanspruchten Prüfkörpers [m<sup>2</sup>] und  $\varepsilon_t$  = technische Verzerrung [1].

Ursächlich für die Wahl der Prüfstände war abgesehen von der Frage der zeitlichen Verfügbarkeit der Prüfanlagen insbesondere die Zielsetzung der jeweiligen Kriechversuche. Da die in den Abb. 3.26 gezeigten Prüfanlagen nicht über die Möglichkeit einer versuchsbegleitenden Volumen- und Ultraschallwellenmessung verfügen, können mit ihnen allein die schadigungsinduzierten Kriech- bzw. Verformungseffekte nicht quantifiziert werden. Hierzu erforderlich ist grundsätzlich eine Trennung der im Versuch gemessenen Kriech- bzw. Verzerrungsrate in schadigungsfreie und schadigungsinduzierte Verzerrungsanteile. Grundsätzlich kann diese Aufteilung realisiert werden, indem auf den UCc-Prüfständen nach Abb. 3.26 Kriechversuche mit Beanspruchungen unterhalb der Dilatanzgrenze durchgeführt werden (→ schadigungsfreies Kriechen) und auf den in Abb. 3.12 (Seite 55) gezeigten Prüfanlagen Kriechversuche mit Beanspruchungen oberhalb der Dilatanzfestigkeit (→ schadigungsinduziertes und schadigungsfreies Kriechen). Die rechnerische Aufbereitung der gesamten Kriechverzerrung in schadigungsfreie und schadigungsinduzierte Anteile kann entsprechend den nachfolgenden Ausführungen dann durch Subtraktion der auf Basis dilatanzfreier Kriechversuche (Stoffmodell und Stoffmodellparameter für schadigungsfreies Kriechen) berechneten Kriechverzerrungen von den messtechnisch ermittelten Gesamtverzerrungen erfolgen. Dabei unberücksichtigt bleibt jedoch, dass auf Grund der prüfkörperbezogenen natürlichen Streuung der transienten und stationären Kriechverzerrungen von in der Größenordnung ca. ½ bis 1 Zehnerpotenz die vom Beanspruchungsniveau und der Temperatur abhängige schadigungsfreie Kriechrate nur mit mäßiger Genauigkeit bzw. innerhalb eines Streubreitenbandes quantifiziert werden kann. In der Konsequenz kann nicht ausgeschlossen werden, dass die auf der Grundlage von Kriechversuchen unterhalb der Dilatanzgrenze rechnerisch ermittelte schadigungsfreie Kriechrate größer sein kann als die in einem Versuch mit Beanspruchungen im Dilatanzregime messtechnisch ermittelte gesamte Kriechrate. Eine Auswertung derartiger Versuche bzw. die Ableitung von Stoffmodellparametern für das schadigungsinduzierte Kriechen ist in solchen Fällen nicht möglich. Daher ist hier eine modifizierte Vorgehensweise zu wählen.

Unter dem Zugeständnis eines signifikant größeren versuchstechnischen Aufwandes deutlich besser geeignet sind vor dem vorstehend skizzierten Hintergrund mehrstufige Kriechversuche mit versuchsbegleitender Messung von Volumenverzerrung und Ultraschallwellengeschwindigkeit zur Quantifizierung der Schädigung. Dabei wird zunächst in wenigstens zwei vorlaufenden Laststufen mit Beanspruchungen unterhalb der Dilatanzfestigkeit das schädigungsfreie Kriechen des Prüfkörpers bestimmt, bevor dann in einer abschließenden dritten Laststufe durch Erhöhung der deviatorischen Beanspruchung auf ein Niveau oberhalb der Dilatanzfestigkeit die schädigungsinduzierten Kriechverzerrungen bzw. die tertiäre Kriechphase aktiviert werden. Im Ergebnis dieser Vorgehensweise sind für ein und denselben Prüfkörper sowohl das schädigungsfreie wie auch das schädigungsinduzierte Kriechvermögen bekannt und quantifizierbar. Die aus der sonst üblichen Streubreite des Materialverhaltens resultierenden Unwägbarkeiten sind dadurch eliminiert. Eine streubreitenbezogene Ermittlung der Gesteinskennwerte erfolgt dann nicht über die Messwerte unmittelbar, sondern erst mittelbar über die Generalisierung der prüfkörperindividuellen und ebenfalls einem Streubereich unterliegenden Materialkennwerte.

### **3.6.2 Versuchsauswertung**

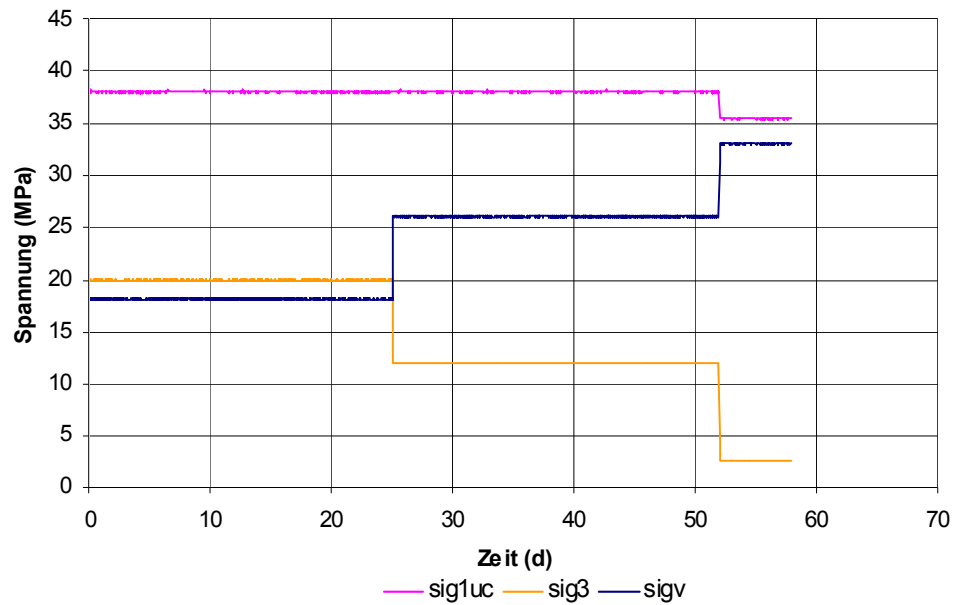
Im Folgenden wird auf die Auswertung von Kriechversuchen eingegangen, wie sie üblicherweise bei Steinsalzprüfkörpern für die Ermittlung der Parameter für das Stoffmodell HOU/LUX vorgenommen werden. Exemplarisch werden dabei Versuche an Steinsalzprüfkörpern, z. B. aus der Asse, vorgestellt.

Während der Kriechversuche werden die installierten Messwertaufnehmer kontinuierlich abgefragt und die jeweiligen Messwerte in den vorgegebenen Intervallen elektronisch gespeichert. Aus diesen Messwerten wird zunächst zur Dokumentation und Kontrolle der versuchsspezifisch vorgegebenen Beanspruchungen je Versuch ein Diagramm entsprechend Abb. 3.27 erstellt.

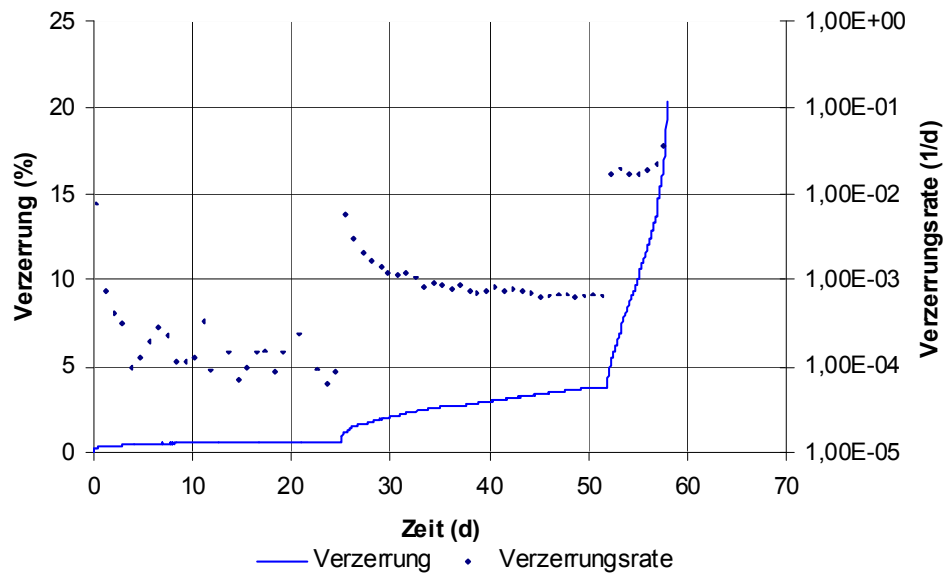
Die aus den weiteren Messwerten der Kriechversuche zum Deformationsverhalten des Prüfkörpers abgeleiteten Kennlinien in Form von Verzerrungs-Zeit-Diagrammen sowie Kriechraten-Zeit-Diagrammen zeigt exemplarisch Abb. 3.28.

Charakteristisch für das schädigungsinduzierte Kriechen sind schließlich die zeitabhängige Entwicklung der Dilatanz entsprechend Abb. 3.29 und die zeitabhängige Ent-

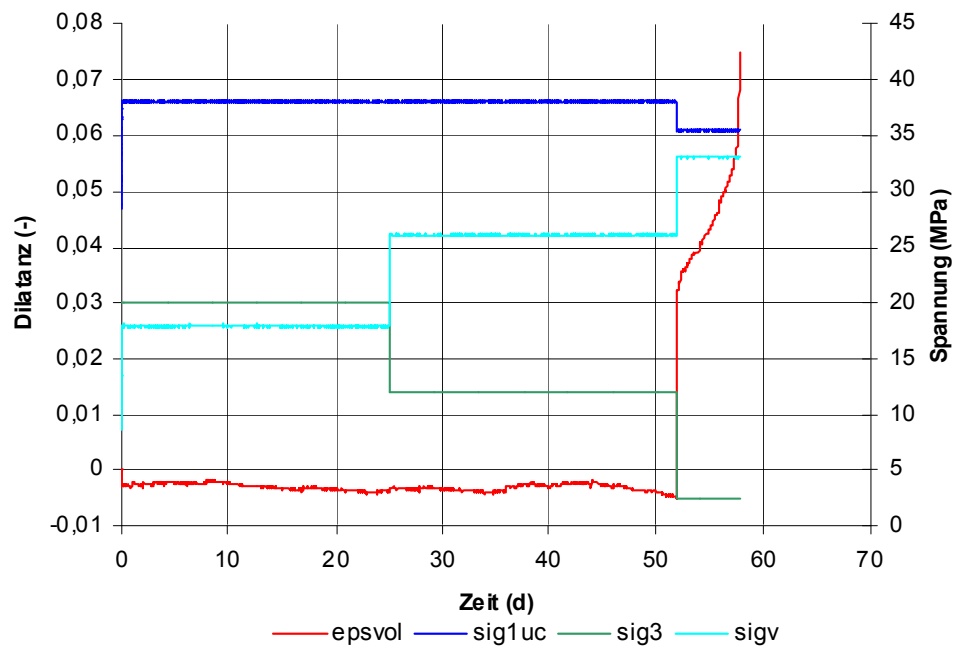
wicklung der Ultraschallwellengeschwindigkeit entsprechend Abb. 3.30. Den Aufträgen in Abb. 3.29 und Abb. 3.30 kann entnommen werden, dass innerhalb der ersten beiden, im Beanspruchungsniveau unterhalb der Dilatanzfestigkeit liegenden Laststufen erwartungsgemäß weder dilatante Verformungen noch eine Reduktion der Ultraschallwellengeschwindigkeit in Folge der Ausbildung von Mikrofissuren beobachtet werden (keine Schädigung).



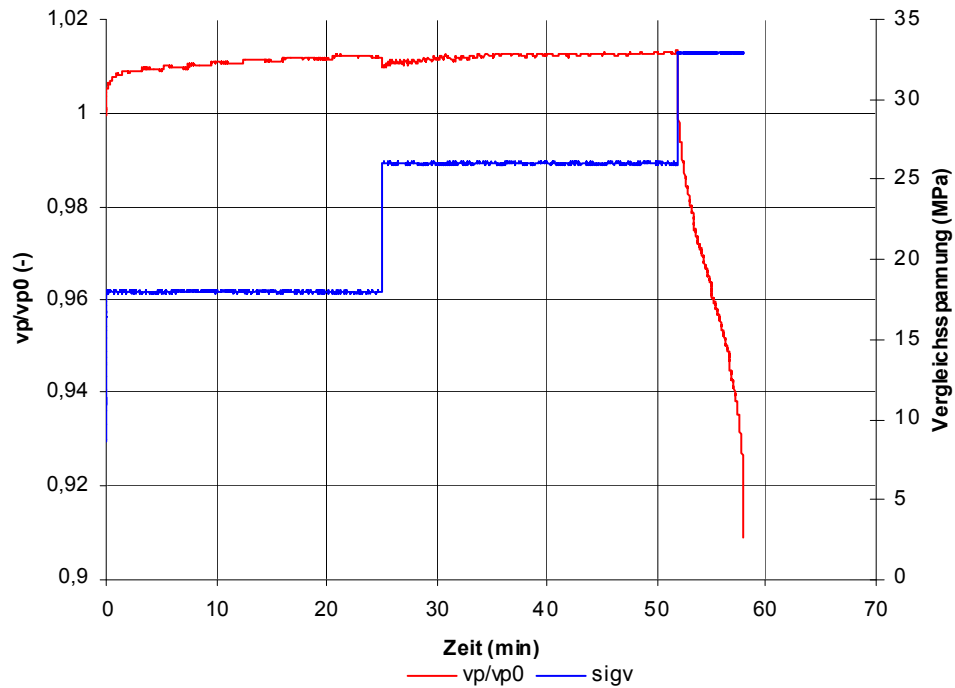
**Abb. 3.27** Spannungs-Zeit-Diagramm TCC-Versuch Asse-223



**Abb. 3.28** Verzerrung und Verzerrungsrate in Abhängigkeit von der Versuchszeit (TCc-Versuch Asse-223)



**Abb. 3.29** Dilatanz in Abhängigkeit von der Versuchszeit (TCc-Versuch Asse-223)



**Abb. 3.30** Ultraschallwellengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Versuchszeit (TCc-Versuch Asse-223)

Erst mit Beginn der dritten Laststufe und damit einer mit Erhöhung der deviatorischen Beanspruchung auf ein Niveau im Dilatanzregime zeigt sich die Schädigung des Materials durch eine signifikante Abnahme der Ultraschallwellengeschwindigkeiten und eine deutliche Zunahme dilatanter Verformungen. Die Abbildung der von der Beanspruchungsintensität geprägten Dilatanz- und Schädigungsrate in einem physikalischen Modell erfolgt durch die nachstehend erläuterte Ableitung der Parameter  $a_0$  bis  $a_3$  sowie  $a_{15}$  bis  $a_{17}$ .

### 3.6.3 Ergebnisse

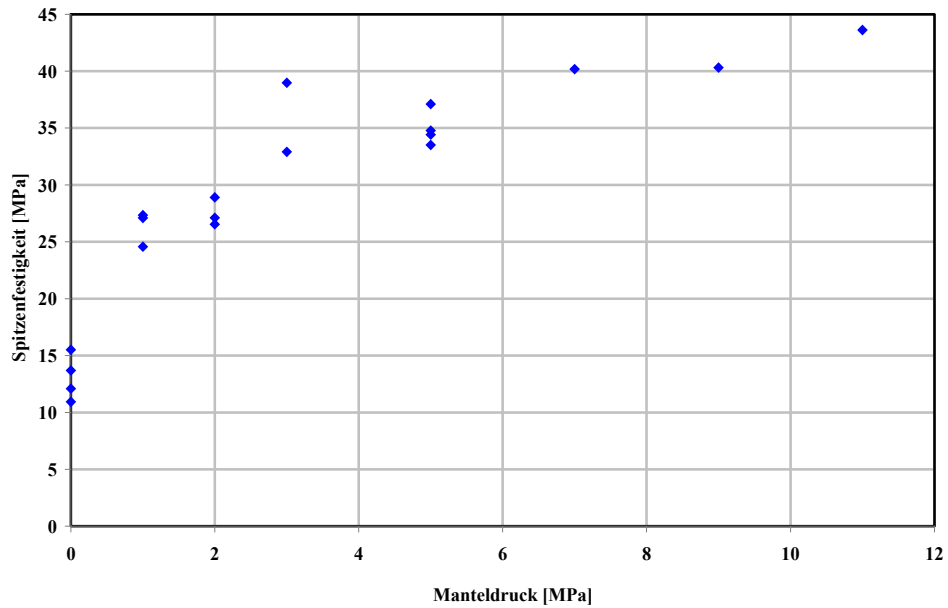
Die Untersuchungen zum Kriechverhalten sind mit 9 einaxialen Kriechversuchen begonnen worden, da in den Zeitstandsprüfern bis zu drei Prüfkörper simultan belastet werden können und so in vergleichsweise kurzer Zeit eine größere Anzahl an Versuchsdaten zur Auswertung bereit steht. Für die Abschätzung der in den Kriechversuchen vorzugebenden Belastungen wurden die Ergebnisse der triaxialen Kurzzeitversuche herangezogen, Kap. 3.4.3. Diese haben gezeigt, dass die triaxialen Spitzenfestigkeiten von  $\beta \approx 40 - 45$  MPa bei  $\sigma_{2,3} = 11$  MPa Manteldruck auf  $\beta \approx 28 - 33$  MPa bei  $\sigma_{2,3} = 1$  MPa Manteldruck zurückgehen, Abb. 3.23. Eine Extrapolation

dieser Daten auf einaxiale Beanspruchungsverhältnisse ergibt eine einaxiale Spitzenfestigkeit von  $\beta_u \approx 26 - 31$  MPa. Aus Erfahrung sollen die maximalen Belastungen bei Kriechversuchen in etwa die halbe Spitzenfestigkeit nicht überschreiten. Darauf basierend wurden in drei Prüfständen jeweils drei Prüfkörper untersucht mit einer einaxialen Belastung von  $\sigma_1 = 12, 10$  und  $8$  MPa.

Bereits bei der Lastaufgabe hat sich bei 5 der 9 Prüfkörper gezeigt, dass die vorgegebenen Beanspruchungen nicht ertragen wurden und die Prüfkörper vorzeitig mit der Ausbildung von Makrobrüchen reagieren. Die restlichen 4 Prüfkörper sind im Lauf des nächsten oder übernächsten Tages zerbrochen. Trotz der vorher vorgenommenen Abschätzung und der Berücksichtigung einer Streubreite als zusätzlicher Sicherheit ist die einaxiale Spitzenfestigkeit der SVV-Prüfkörper somit augenscheinlich als deutlich zu hoch eingeschätzt worden.

Die SVV-Prüfkörper müssten demnach in den einaxialen Versuchen eine deutlich geringere Spitzenfestigkeit aufweisen als in den triaxialen Versuchen bei  $\sigma_{2,3} = 1$  MPa. Um diese Annahme zu überprüfen, wurden weitere Versuche vorgenommen und die Prüfkörper einaxialen Beanspruchungen ausgesetzt. Die erhaltenen einaxialen Spitzenfestigkeiten sind zusammen mit den triaxialen Spitzen-Bruchfestigkeiten in Abb. 3.31 dargestellt. Die gemessenen einaxialen Spitzenfestigkeiten schwanken hierbei zwischen  $\beta_u = 11,0$  und  $15,5$  MPa und erreichen damit nur deutlich geringere Zahlenwerte als erwartet.

Im Zuge dieser einaxialen Festigkeitsversuche wurden zusätzlich noch weitere Triaxialversuche gefahren, und zwar zwei Versuche bei  $\sigma_{2,3} = 1$  MPa und drei Versuche bei  $\sigma_{2,3} = 2$  MPa. Diese fünf Versuche zeigen eine gute Übereinstimmung mit den zuvor ermittelten triaxialen Bruchfestigkeiten (Abb. 3.31). Somit kann der unwahrscheinliche Fall ausgeschlossen werden, dass die geringe einaxiale Spitzenfestigkeit daraus resultiert, dass sich unbemerkt die Herstellungsprozedur oder die Eigenschaften der Ausgangsstoffe verändert haben. Vielmehr ist die geringe einaxiale Spitzenfestigkeit tatsächlich auf das Materialverhalten des angemischten SVV unter diesen Beanspruchungsbedingungen zurückzuführen. Rückwirkend kann somit auch bestätigt werden, dass die Prüfkörperherstellung durch Anmischen zu reproduzierbaren Ergebnissen führt.



**Abb. 3.31** Manteldruck abhängige Spitzenfestigkeit; bis ca. 1 MPa ist näherungsweise eine lineare Abnahme zu beobachten, danach bricht sie signifikant ein

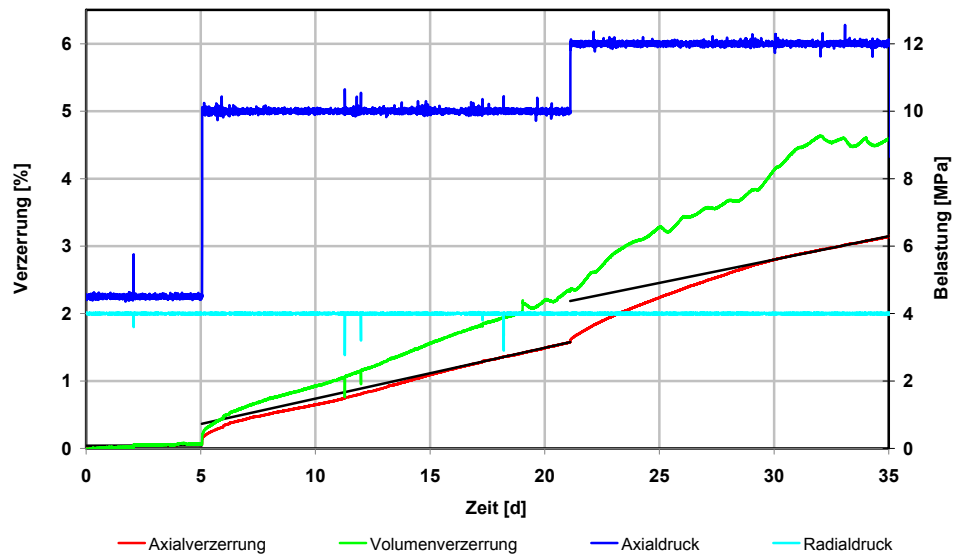
Im Gegensatz zu diesen speziellen Laborversuchen ist in situ allerdings von einem mehraxialen Beanspruchungszustand auszugehen, so dass folglich auch von einem Kriechen unter triaxialer Beanspruchung ausgegangen werden kann. Daher wurden anstelle von weiteren einaxialen Versuchen bei Minimalspannung  $\sigma_{2,3} = 0$  MPa nunmehr versuchstechnisch deutlich aufwendigere triaxiale Kriechversuche durchgeführt. Insgesamt sind 3 triaxiale Kriechversuche durchgeführt worden, wobei jeder Versuch mit einer dem eigentlichen Kriechversuch vorlaufenden fünftägigen Vorkompaktionsphase begonnen wurde, in der den Prüfkörpern eine isostatische Belastung von  $\sigma_{iso} = 4, 7$  bzw.  $\sigma_{iso} = 10$  MPa aufgeprägt wurde. Durch diese Vorkompaktionsphase sollte das Material so weit kompaktiert werden, dass während des Kriechens möglichst keine weitere Kompaktion auftritt und somit auch Kompaktionsverhalten und Kriechverhalten des SVV getrennt voneinander ermittelt und in die physikalische Modellierung überführt werden können. Da der Kompressionsversuch entsprechend Abb. 3.24 innerhalb von 3 h eine nur minimale bis keine Volumenkompaktion erkennen ließ, erschien eine Vorkompaktionsphase von 5 Tagen als ausreichend, um die Prüfkörper in hinreichendem Maße zu kompaktieren.

Bei der Auswertung der Versuche hat sich allerdings gezeigt, dass auch diese schon verlängerte Vorkompaktionsphase nicht ausreichend war, da im Rahmen der Kriech-



versuche auch eine weitere Kompaktion des Materials nach dem fünften Tag erfolgte (Abb. 3.32). Während der beiden Belastungsstufen des Kriechversuches nimmt das Volumen bei Versuch SVV273 um insgesamt  $\varepsilon_{Vol} = 4,5 \%$  ab. Bei Versuch SVV274 sind es etwa  $\varepsilon_{Vol} = 11 \%$  und bei Versuch SVV275 sogar  $\varepsilon_{Vol} = 13 \%$ . Somit ist in den gemessenen Kriechverformungen  $\varepsilon_1$  ein signifikanter Anteil an Kompaktionsverformung enthalten. Unter der Annahme, dass die Prüfkörper einer isotropen Belastung ausgesetzt werden, stehen Volumen- und Längenverzerrung bei kleinen Verzerrungen näherungsweise im Verhältnis 3:1. In den Kriechversuchen liegt jedoch keine isostrophe Belastung vor, und die Anwendung dieser Näherung führt ohne weitere Annahmen nicht zu realistischen Ergebnissen. Für realitätsnähere Ergebnisse müsste z. B. ein Modell für den Zusammenhang zwischen Belastung und Kompaktion entwickelt werden. Dieser Zusammenhang ist jedoch nicht aus den Kriechversuchen ableitbar.

Da mit dem Stoffmodell LUBBY2 eine volumentreue Verformung beschrieben wird, ist dieses Stoffmodell nicht geeignet, das Materialverhalten des angemischten SVV zu beschreiben. Erforderlich sind ein Stoffmodell, das sowohl Kompaktion wie auch Kriechen beschreiben kann und eine entsprechende Anzahl an Kriech- und Kompaktionsversuchen, um die jeweiligen Parameter zu ermitteln. Da weitere Versuche im Rahmen dieses Forschungsvorhabens aus Zeitgründen nicht durchführbar sind, wird mit einem ersten Ansatz versucht, das Kompaktionsverhalten dadurch näherungsweise zu beschreiben, dass die Materialparameter aus den insgesamt gemessenen Axialverzerrungen abgeleitet werden. Auf diese Weise würde die Kompaktion des SVV durch ein erhöhtes Kriechvermögen abgebildet werden. Bei der Interpretation der Ergebnisse muss selbstverständlich berücksichtigt werden, dass diese Abbildung des Kompaktionsverhaltens nur eine grobe Näherung darstellt. Eine realitätsnähere Modellierung des Materialverhaltens von angemischtem SVV mit Kriechen und Kompaktion muss einem Folgeprojekt vorbehalten bleiben.

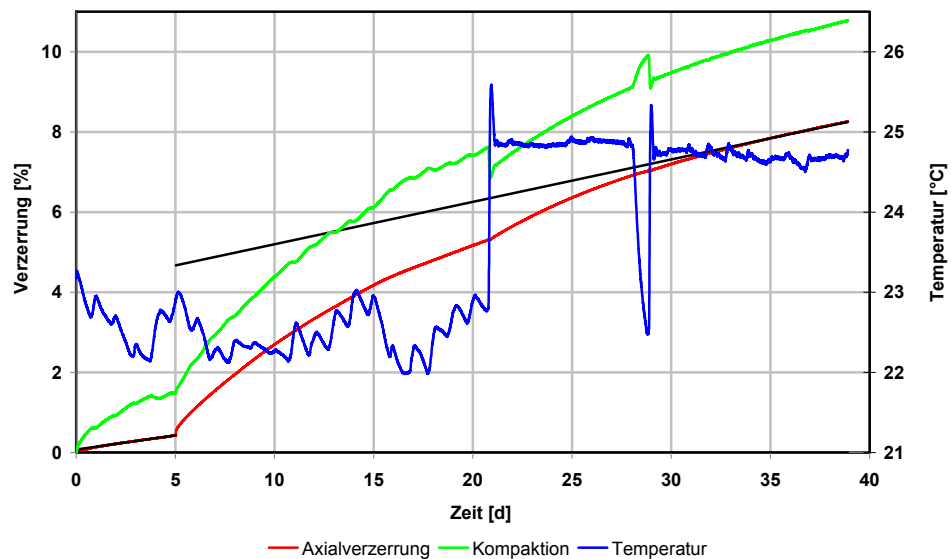


**Abb. 3.32** Kriechversuch am Prüfkörper SVV273 mit Belastungsablauf sowie Axial- und Volumenverzerrung

Weiterer Untersuchungsbedarf besteht auch hinsichtlich der Versuchsdauer, denn trotz verlängerter Belastungsstufen in den Versuchen SVV274 und SVV275 ist innerhalb der Versuchsdauer von knapp 40 d nicht eindeutig zu erkennen, ob der stationäre Zustand erreicht wurde oder ob die Verzerrungsraten weiter rückläufig sind (Abb. 3.33). Streng genommen müsste somit ein Langzeitversuch durchgeführt werden, bei dem die Belastungsstufen so lange gehalten werden, bis die Kompaktion zum Erliegen gekommen ist und es sich in den weiteren Deformationen zeigt, ob das Material überhaupt ein stationäres Kriechen aufweist.

Überraschend bei der Auswertung des Versuches SVV273 ist weiterhin, dass die angenähert eingeschätzten stationären Kriechverzerrungen, die in Abb. 3.32 zum Ende der jeweiligen Kriechphase als schwarze Linie eingezeichnet sind, mit zunehmender Belastung abnehmen. Diese zunächst widersprüchliche Beobachtung resultiert ebenfalls aus der überlagerten Kompaktion, die in den insgesamt gemessenen Verzerrungen enthalten ist und die in der zweiten Versuchsphase mit höherer Beanspruchung geringer ist und somit zu scheinbar kleineren Kriechverformungen führt. Auch bei Betrachtung der Ergebnisse der beiden einstufigen Versuche SVV274 und SVV275 zeigt sich, dass bei der höheren Belastung eine kleinere stationäre Verformungsrate vorliegt – verursacht ebenfalls durch die Ausweitung der überlagerten Kompaktion, da bei dem Versuch mit dem höheren Deviator der Manteldruck niedriger und somit auch die Kompaktion geringer ist. An dieser Stelle kann bereits festgehalten werden, dass eine Be-

stimmung der Materialparameter für das Stoffmodell LUBBY2 aus diesen Versuchen nicht möglich ist.



**Abb. 3.33** Versuch SVV274 mit gemessenen Axial- und Volumenverzerrungen sowie der gemessene (Raum)Temperatur

Wie bei Steinsalz ist auch bei SVV die Kriechrate bzw. die Kompaktionsrate signifikant von der Temperatur abhängig. Abb. 3.33 zeigt, dass eine Erhöhung der Temperatur um nur 2 °C hier bereits zu einer deutlichen Änderung der Kriech- bzw. Kompaktionsraten führt, vergleichbar mit der Materialreaktion auf eine neue Belastungsstufe.

### 3.6.4 Weiterführende Beobachtungen im Rahmen der Kriechversuche

Die Kriechversuche zeigen, dass das zeitabhängige Materialverhalten in erster Linie durch Kompaktion geprägt ist. Ein Ziel war es folglich, die in den Kriechversuchen beobachteten Kompaktionsverformungen auszuwerten und nach Möglichkeit in ein physikalisches Modell zu überführen. Dazu werden jedoch zu jedem Versuch die Anfangsverzerrungen, die bei der Herstellung des Kraftschlusses und bei der Aufbringung der isostatischen Belastung auftreten, benötigt. Diese Anfangsverzerrungen sind bei den Kriechversuchen mit SVV jedoch analog zu Versuchen mit Steinsalz nicht mitgemessen worden. Um diese Anfangsverzerrungen im Nachhinein zu bestimmen, sind die Prüfkörperlängen vor und nach dem Versuch mit den im Versuch gemessenen Stempelverschiebungen verglichen worden (Tab. 3.7).

**Tab. 3.7** Vergleich der Prüfkörperlänge am Ende der Versuche mit der gemessenen Prüfkörperlänge nach dem Ausbau der Prüfkörper

|  | <b>SVV273</b> | <b>SVV274</b> | <b>SVV275</b> |
|--|---------------|---------------|---------------|
| Prüfkörperlänge nach Versuch [mm]              | 177,4         | 165,5         | 164           |
| Axialdruck ( $t_{\text{Versuchsende}}$ ) [MPa] | 12,0305       | 17,9548       | 16,9828       |
| Länge unter Belastung [mm]                     | 177,114       | 165,102       | 163,627       |
| Prüfkörperlänge vor Versuch [mm]               | 180,0         | 180,0         | 180,0         |
| Stauchung ( $t_{\text{Versuchsende}}$ ) [mm]   | 5,670         | 14,868        | 20,752        |
| Länge laut Messdaten [mm]                      | 174,3         | 165,1         | 159,2         |
| Vorkompaktion [mm]                             | -2,784        | 0,031         | -4,379        |

Für einen direkten Vergleich der Prüfkörperlängen wurden die nach dem Versuch gemessenen Prüfkörperlängen mit Hilfe eines mittleren E-Moduls des SVV in die entsprechenden Längen umgerechnet, die der Prüfkörper unter der zu Versuchsende vorliegenden Axialbelastung rechnerisch gehabt haben müsste. Die Länge der Prüfkörper ohne Vorkompaktion ergibt sich aus der ursprünglichen Prüfkörperlänge abzüglich der im Versuch erreichten Stauchung zu Versuchsende. Überraschenderweise sind die so berechneten Vorkompaktionen der Prüfkörper SVV273 und SVV275 negativ. Eine wiederholte Messung der Prüfkörperlänge des Prüfkörpers SVV275 zu einem späteren Zeitpunkt zeigte, dass der Prüfkörper SVV275 innerhalb weniger Wochen um eine Länge von  $\Delta l = 0,8$  mm gewachsen ist. Der angemischte kompaktierte SVV zeigt folglich bei Entlastung eine zeitabhängige Volumenzunahme, die im Fall des Prüfkörpers SVV275 mit  $\varepsilon_1 = 5$  mm deutlich größer ist als die rein elastische Dekompression von  $\varepsilon_1 = 0,3$  mm. Aus mechanischer Sicht ist dieses Phänomen einer Längenzunahme (möglicherweise sogar einer Volumenausdehnung) ungewöhnlich und vermutlich durch chemische Prozesse bedingt. Es ist z. B. denkbar, dass in den Poren des SVV-Materials noch unreaktiertes Wasser vorliegt, das durch die Aufweitung des Materials bei Entlastung Zugang zu noch nicht vollständig hydratisiertem  $\text{MgSO}_4$  bekommt und dieses dann weiter hydratisiert, auf diese Weise das Festvolumen vergrößert und so zu einer Volumenausdehnung des Prüfkörpers führt.

Zusammenfassend kann an dieser Stelle festgehalten werden, dass zum Verständnis des Materialverhaltens von SVV noch in erheblichem Maße Bedarf an weiteren Untersuchungen besteht, der sich aus den Erkenntnissen im Rahmen dieses Projektes ergeben hat, jedoch durch die geplanten Versuche nicht abgedeckt werden konnte und auch durch die zusätzlichen Untersuchungen bei weitem noch nicht geklärt werden

konnte. Von großem Interesse ist hier z. B. die oben angesprochene Volumenausdehnung bei Entlastung, die über weitere chemische Reaktionen zu einer Riss-schließung im Versatz führen könnte, ohne dass dazu ein Zutritt von Lösungen notwendig ist.

Um unter diesen komplexen Umständen einen Materialparametersatz für die in Kap. 8 vorzunehmende rechnerische Simulation der Bohrlochlagerung zu erhalten, sind in Ermangelung weiterer Untersuchungen die Kriechversuche herangezogen und daraus die Materialparameter für das Stoffmodell Korthaus/Hein so bestimmt worden, dass die Gesamtverzerrungen möglichst gut abgebildet werden (Kap. 4.1.2).

### **3.7 Permeationsmessungen**

Um weiterführende Kenntnisse über das Materialverhalten von SVV zu bekommen, wurden zusätzlich zum geplanten Arbeitsprogramm Permeationsversuche an den Prüfkörpern SVV227, SVV228, SVV234 und SVV235 am Triaxialpermeameter des Instituts für Erdöl und Erdgastechnik durchgeführt. Neben der Möglichkeit, die Prüfkörper mit inerten Fluiden wie z. B. Stickstoff oder Hexan zu durchströmen, kann auch eine Durchströmung mit reaktiver NaCl-Lösung vorgenommen und somit die Lösungspermeabilität kontinuierlich bestimmt werden. Um Veränderungen in der Struktur der Prüfkörper erkennen zu können, wurden diese mittels Röntgentomografie zerstörungsfrei durchleuchtet und räumliche Absorptionsprofile aufgenommen. Zusätzlich wurden die durch den Prüfkörper geströmten Lösungen auf ihre chemische Zusammensetzung untersucht, um Rückschlüsse auf chemische Prozesse während der Durchströmung ziehen zu können.

#### **3.7.1 Auswertung der Triaxialpermeameterversuche**

Der Aufbau des Triaxialpermeameters ähnelt den in Kap. 3.4 (Seite 54) beschriebenen Triaxialprüfständen. Daher wird hier nur noch auf die zum Verständnis der folgenden Kapitel notwendigen Unterschiede eingegangen. Eine detaillierte Beschreibung der Anlage und der Versuchsauswertung ist [PUS 08] zu entnehmen. Die Auswertung der mechanischen Parameter erfolgt analog zu der bereits in Kap. 3.4.2 (Seite 56) beschriebenen Auswertung. Die Berechnung der Permeabilität erfolgt je nach Fluid und Messmethode mit Hilfe der folgenden Formeln:

a) für näherungsweise inkompressible Fluide (NaCl-Lösung):

$$k_{\text{flüssig}} = \frac{L \cdot \mu \cdot \dot{Q}_{\min} \cdot \frac{10^{-6}}{60}}{\Delta P \cdot 10^5 \cdot A_{\text{quer}} + \text{eps}} \quad (3.9)$$

b) für kompressible Fluide (Stickstoff):

$$k_{\text{gas}} = \frac{2 \cdot L \cdot \mu \cdot \dot{Q}P_{\min} \cdot \frac{1}{6}}{\text{abs}(P_1^2 - P_2^2) \cdot 10^{10} \cdot A_{\text{quer}} + \text{eps}} \quad (3.10)$$

mit  $L$  = ursprüngliche Länge des Prüfkörpers abzüglich der aktuellen Verformung [m],  $\mu$  = Viskosität (temperaturabhängig) [Pa·s], z. B. bei 20 °C  $1,99 \cdot 10^{-3}$  Pa·s für NaCl-Lösung,  $1,834 \cdot 10^{-5}$  Pa·s für Stickstoff,  $\dot{Q}$  = mittlere gemessene Fließrate der Iscopumpen [ml/min],  $\dot{Q}P_{\min}$ ,  $\dot{Q}P_{\max}$  = Minimal- bzw. Maximalwert des Produktes aus Fließrate und Druck [bar·ml/min],  $\Delta P$  = Absolutwert der Druckdifferenz zwischen den beiden Iscopumpen [bar],  $A_{\text{quer}}$  = effektive Querschnittsfläche des Prüfkörpers [m<sup>2</sup>], abs = Absolutwert und eps = Rechengenauigkeit [1]<sup>3</sup>

Eine Besonderheit des Triaxialpermeameters des ITE darin besteht, dass die Porendrücke an beiden Endflächen des Prüfkörpers separat vorgegeben werden können und somit vermieden werden kann, dass bei Untersuchungen mit hohen mittleren Porendrücken und Atmosphärenrückdruck nahezu der doppelte mittlere Porendruck als Vordruck verwendet werden muss und so ein großer Porendruckgradient über die Prüfkörperlänge ansteht. Für die Permeationsmessungen hat diese Messtechnik neben einer höheren Genauigkeit noch den Vorteil, dass durch die Messung sowohl der in den Prüfkörper einfließenden wie auch der aus dem Prüfkörper ausfließenden Fluidmenge eine kontinuierliche Kontrolle der Messungen über eine Volumenbilanz möglich ist. Stimmen die messtechnisch ermittelten, in den Prüfkörper ein- und ausfließenden Fluidmengen im Rahmen der Messgenauigkeit nicht überein, kann davon ausgegangen werden, dass ein Fehler im hydraulischen System vorliegt, z. B. die Messung (noch) nicht stationär ist oder eine Leckage im System besteht. Bei nicht inerten Fluiden ergibt sich hieraus ein Hinweis auf das Porenvolumen ändernde Reaktionen zwischen Fluid und Mineralphasen.

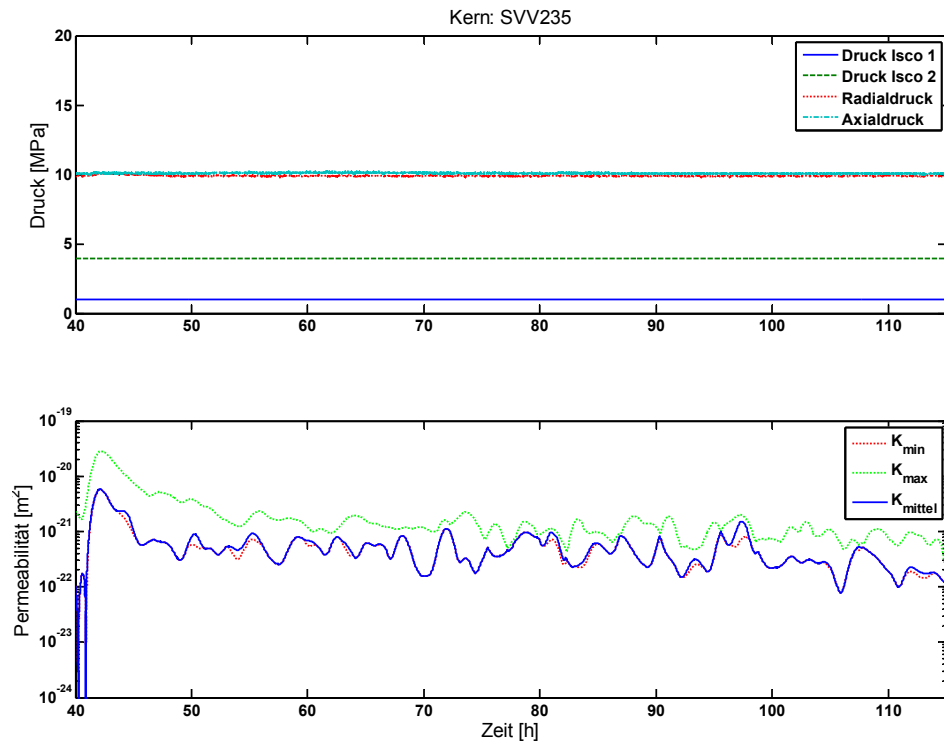
---

<sup>3</sup> Um eine Division durch Null zu vermeiden, wird im Nenner die Rechengenauigkeit addiert. Auf das Ergebnis hat der Zusatzterm keinen Einfluss, da die Rechengenauigkeit um viele Größenordnungen kleiner ist als die Messgenauigkeit.

Mit dem Triaxialpermeameter kann nicht nur die Permeabilität kontinuierlich gemessen werden, sondern darüber hinaus auch simultan ihre Streubreite bestimmt werden. In den folgenden Abbildungen sind aus diesem Grund neben dem Verlauf der mittleren Permeabilität auch die Verläufe eines minimalen und eines maximalen Permeabilitätswertes dargestellt, berechnet aus der minimalen und aus der maximalen Fließrate, wobei weitere Fehlerquellen wie z. B. die Genauigkeit der Differenzdruckmessung und der Fließraten berücksichtigt wurden. Der Abstand des Verlaufs der mittleren Permeabilität von den Verläufen der minimalen und der maximalen Permeabilitäten dient damit als Indikator für die Qualität einer Messung.

Da die bisherigen Kurzzeitversuche an angemischten SVV-Prüfkörpern nach Kap. 3.4.3 darauf hindeuten, dass sich das Material ähnlich verhält wie Steinsalz, wurde der erste Prüfkörper SVV235 entsprechend den Messungen an Salzprüfkörpern mit einer isostatischen Beanspruchung von  $\sigma_i = 10$  MPa und einem Fluidruck von  $P_f = 20$  bar (Eingangsseite) zu 10 bar (Ausgangsseite) beaufschlagt. Hierbei zeigte sich bereits, dass die Aufsättigung des Porenraumes sehr langsam vonstatten geht erster Hinweis bereits auf eine sehr kleine Permeabilität. Stationäre hydraulische Bedingungen wurden erst nach über 30 h erreicht. Um bei der kleinen Permeabilität ein genaueres Messergebnis zu erhalten, wurde der Vordruck auf 40 bar erhöht und damit die Druckdifferenz bzw. der Gradient verdreifacht. Wie in Abb. 3.34 zu erkennen ist, hat sich nach ca. 50 h eine Permeabilität von  $K < 10^{-21}$  m<sup>2</sup> eingestellt. Bedingt durch diese kleine Permeabilität liegt die kontinuierliche Messung im Bereich der Messgrenze, erkennbar in den Schwankungen der Minimal- bzw. Maximalwerte der Permeabilität und ihrer Differenz sowie den Schwankungen der ermittelten Permeabilitätswerte. Trotz der Schwankungen ist erkennbar, dass die Permeabilität, nach dem Erreichen eines stationären Zustandes bei ca. 40 h Versuchsdauer erreicht wurde, im weiteren Verlauf tendenziell noch weiter rückläufig ist.

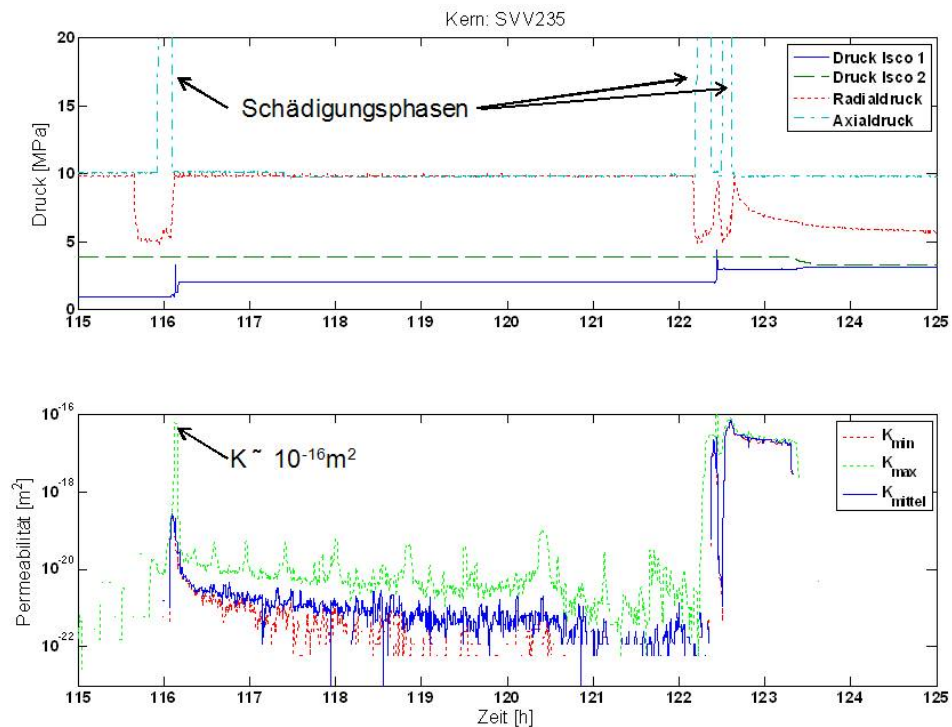
Da sich der ungeschädigte Prüfkörper bereits für Stickstoff als relativ gering durchlässig erwiesen hat, wurde an dieser Stelle auf eine Durchströmung mit NaCl-Lösung verzichtet, da sich aufgrund der höheren Viskosität die Messzeiten bis zum Erreichen einer konstanten Permeabilität verhundertfachen würden und somit im Zeitrahmen des Projekts nicht mehr durchführbar wären. Deshalb wird der Prüfkörper SVV235 vor einer Fortsetzung der Untersuchung zuerst geschädigt um auf diese Weise die Permeabilität zu erhöhen und erst danach mit NaCl-Lösung beaufschlagt.



**Abb. 3.34** Messung der Stickstoff-Ausgangspemeabilität des Prüfkörpers SVV235 ( $K < 10^{-20} \text{ m}^2$ )

Für die Vorschädigung wird der Prüfkörper axial belastet, indem der Manteldruck auf  $\sigma_{2,3} \approx 5 \text{ MPa}$  reduziert wird und der Axialdruck ein oder mehrmals kurzfristig auf  $\sigma_1 > 30 \text{ MPa}$  erhöht wird, bis die gewünschte Durchlässigkeit erreicht ist. Da der Prüfkörper nach der ersten Schädigungsphase trotz einer Prüfkörperverformung von  $\varepsilon_1 \approx 5,3 \%$  immer noch eine Permeabilität von  $K < 10^{-20} \text{ m}^2$  aufweist, sind weitere Schädigungsphasen angeschlossen worden. In der zweiten Schädigungsphase wurde die axiale Verzerrung auf  $\varepsilon_1 \approx 10,8 \%$  erhöht. Dabei sind kurzfristig Flüsse aufgetreten, die Permeabilitäten im Bereich von  $K \approx 10^{-16} \text{ m}^2$  entsprechen. Jedoch reduziert sich diese Permeabilität kurzfristig wieder auf  $K < 10^{-20} \text{ m}^2$  (Abb. 3.35).



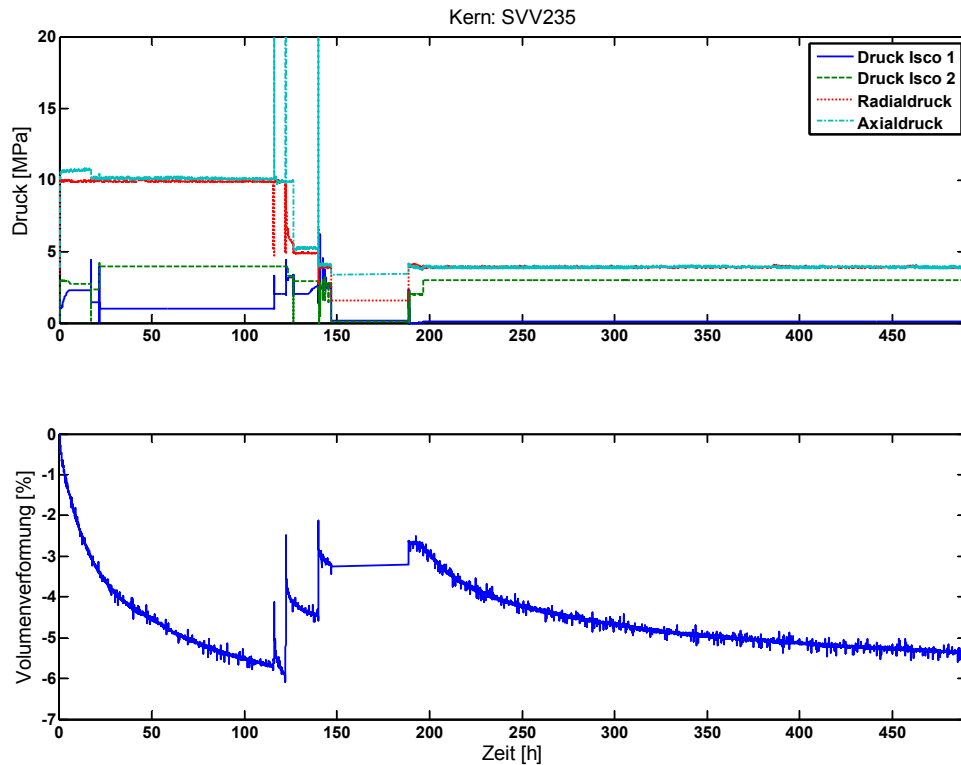


**Abb. 3.35** Messung der Permeabilität nach Vorschädigung

Auch nach der Schädigung des Prüfkörpers werden keine sehr großen Permeabilitäten erreicht, und es ist bereits kurzfristig ein zeitabhängiger Rückgang der Permeabilität zu erkennen

Dies lässt vermuten, dass sich durch die Schädigung zwar der Porenraum vergrößert hat und durch die Aufsättigung dieser Porenräume kurzfristig eine hohe Permeabilität gemessen wurde, doch der Prüfkörper weiterhin nur eine geringe Permeabilität  $K \approx 10^{-19} \text{ m}^2$  aufweist. Erst durch eine weitere Schädigung und damit verbunden eine Erhöhung der axialen Verzerrung auf  $\varepsilon_1 \approx 11,0 \%$  konnte die Permeabilität auf  $K = 3 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$  erhöht werden. Eine weitere Schädigung bei einer axialen Verzerrung von  $\varepsilon_1 \approx 14,2 \%$  führt auf eine mittlere Permeabilität von  $K = 10^{-16}$  bis  $10^{-17} \text{ m}^2$ . Das Material erweist sich demnach auch bei großer deviatorischer Beanspruchung und großen Verzerrungen als überraschend gering permeabel.

Erkennbar ist darüber hinaus sowohl in Abb. 3.34 und Abb. 3.35, dass die Permeabilität im Lauf der Zeit abnimmt. Dieser Effekt ist nach Abb. 3.36 auch bei einer Reduzierung der isostatischen Belastung auf  $\sigma_i = 4 \text{ MPa}$ , zwar weniger ausgeprägt, aber noch deutlich erkennbar vorhanden.



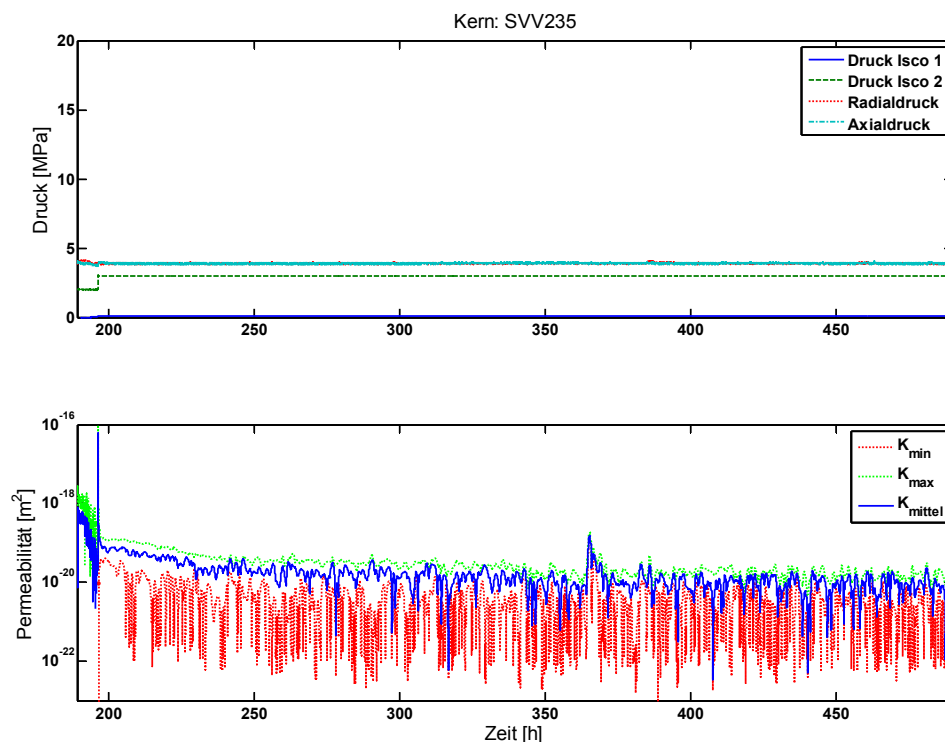
**Abb. 3.36** Während des gesamten Versuchsablaufes findet eine Kompaktion des Prüfkörpers statt, auch bei einer Reduzierung der isostatischen Belastung auf  $\sigma_i = 4$  MPa

Es tritt folglich bereits bei einer isostatischen Belastung von  $\sigma_i = 4$  MPa ein messbarer Rückgang der Permeabilität innerhalb von Stunden ein. Gleichzeitig nimmt das Prüfkörpervolumen um mehrere Prozent ab, Abb. 3.36. Da dieser Rückgang sehr stark ausgeprägt und zugleich irreversibel ist, indiziert er nicht nur die Schließung von vorhandenen Rissen wie bei Steinsalz, sondern auch eine Kompaktion des Prüfkörpers. Abb. 3.36 zeigt auch, dass bei der Schädigung des Prüfkörpers zunächst das Volumen zunimmt, vermutlich durch Bildung von Rissen, und anschließend durch die isostatische Belastung wieder abnimmt, jedoch schneller als vor der Schädigung. Vermutlich werden hierbei die entstandenen Risse wieder geschlossen und führen so zu einer zusätzlichen Volumenverformung.

An dem wie oben beschrieben geschädigten Prüfkörper wird im Anschluss die Permeabilität unter Verwendung von NaCl-Lösung als Fluid gemessen. Hierbei wird der Prüfkörper nur von einer Seite angeströmt / mit Lösungsvordruck beaufschlagt. Auf der Rückdruckseite herrscht zunächst solange Atmosphärendruck, bis Lösung den Prüf-

körper durchströmt hat und die Iscopumpe auf der Rückdruckseite Fluid zurückzieht, um den Druck konstant zu halten.

Bei Prüfkörper SVV235 hat die vollständige Aufsättigung ca. 8 h gedauert. Während der Aufsättigung konnte eine beständige Abnahme der Fließrate beobachtet werden, verbunden mit einer entsprechenden Abnahme der Permeabilität um mehr als 2 Größenordnungen. Im weiteren Verlauf reduziert sich die Permeabilität weiter, allerdings zunehmend langsamer, bis nach knapp 2 Wochen eine Permeabilität von  $K = 10^{-20} \text{ m}^2$  erreicht wird (Abb. 3.37).



**Abb. 3.37** Verlauf der gemessenen NaCl-Lösungs-Permeabilität am Prüfkörper SVV235

Als Fazit konnten aus den Permeationsmessungen an dem durch Anmischen hergestellten Prüfkörper SVV235 folgende Eigenschaften beobachtet bzw. Effekte festgehalten werden:

- eine geringe (Gas-)Ausgangsporeabilität bei einer Beanspruchung von  $\sigma_i = 10 \text{ MPa}$ ,
- eine hohe Bruchverformung,

- ein hohes Kompaktionsvermögen,
- auch bei großen Verzerrungen mit  $\sigma_i = 4 \text{ MPa}$  eine geringe (Gas-)Permeabilität im Bereich von  $K = 10^{-16}$  bis  $10^{-17} \text{ m}^2$ ,
- einen mechanisch bedingten Rückgang der (Gas-)Permeabilität (Rissschließung), auch nach deutlicher Schädigung und bei geringer isostatischer Belastung ( $\sigma_i < 4 \text{ MPa}$ ) und
- einen Rückgang der Permeabilität bei der Durchströmung mit NaCl-Lösung als Fluid.

Die vorstehend genannten Befunde sind in einem analog durchgeführten Versuch an dem Prüfkörper SVV227 bestätigt worden, wobei allerdings auf einen Fluidwechsel verzichtet wurde, denn im Versuch SVV235 zeigte das Material SVV eine Art Verheilung. Eine Aussage, ob diese „Verheilung“ chemischer oder mechanischer Natur ist, ist nicht möglich, da der Prüfkörper sowohl einer mechanischen Belastung als auch einer Änderung des Phasenbestands durch den Lösungszutritt unterliegt. Um eine chemische Selbstverheilung auszuschließen wurde beim Prüfkörper SVV227 auf eine Durchströmung mit NaCl-Lösung verzichtet um bei konstantem Phasenbestand die mechanischen Effekte isoliert von den chemischen beobachten zu können.

Auch im Versuch mit dem Prüfkörper SVV227 konnte wieder ein kurzfristiger Rückgang der Permeabilität nach der Schädigung beobachtet werden, vergleichbar dem Befund im Versuch am Prüfkörper SVV235. Somit ist davon auszugehen, dass die beobachtete Rissschließung einen mechanischen Anteil hat, der einen chemischen Anteil, falls dieser existiert, überprägt. Bezüglich des chemischen Anteils kann festgehalten werden, dass dieser im Vergleich zum mechanischen Anteil nur eine untergeordnete Rolle spielt. Die mechanische Rissschließung ist sogar derart stark ausgeprägt, dass sich die Permeabilität selbst bei einer Belastung in der Höhe der Pumpenleerlaufdrücke von  $P_f$  ca. 2 – 3 MPa verringert und somit die Untersuchung des chemischen Anteils an der Permeabilitätsänderung im Triaxialpermeameter nicht getrennt von dem dominierenden, mechanischen Rissschließungsprozessen möglich ist.

Da die Prüfkörper grundsätzlich schon eine sehr geringe Gasausgangspemeabilität aufweisen und bei der Durchströmung mit NaCl-Lösung die Permeabilität noch weiter abnimmt, ist davon auszugehen, dass ein ungeschädigter SVV-Prüfkörper gegenüber NaCl-Lösung eine extrem geringe Durchlässigkeit aufweist und zwar so gering, dass

eine Messung voraussichtlich Monate benötigen würde. Aus diesem Grund konnte die Lösungspermeabilität nicht in Messungen festgehalten werden.

Anmerkung: Lösungen, in denen neben NaCl noch weitere Mineralphasen gelöst sind, haben im Allgemeinen ein geringeres Lösungspotential als reine NaCl-Lösung, weshalb die SVV-Prüfkörper gegenüber solchen Lösungen eine bestenfalls gleiche oder wahrscheinlicher eine noch geringere Permeabilität aufweisen sollten.

Die im Triaxialpermeameter beprobten Prüfkörper haben einen Durchmesser von 60 mm und eine Länge von 150 mm, während die übrigen Prüfkörper für die Kurzzeit-, Kompressions- und Kriechversuche auf 90 x 180 mm abgedreht wurden. Falls die Prüfkörper Inhomogenitäten aufweisen sollten, könnte dies dazu führen, dass die Prüfkörper im Triaxialpermeameter andere Materialeigenschaften aufweisen, als die bisherigen. Um dies auszuschließen wurde der Prüfkörper SVV276 auf die üblichen Abmessungen 90 x 180 mm abgedreht, durchschallt und anschließend nochmals auf 60 x 150 mm abgedreht und nochmals durchschallt. Dabei wurden die folgenden Werte gemessen:

Tab. 3.8 zeigt, dass die dynamischen Messwerte sehr genau übereinstimmen und die bestimmten Dichten sind im Rahmen der Messgenauigkeit sogar identisch. Somit kann davon ausgegangen werden, dass die mechanischen Eigenschaften unabhängig von den Prüfkörperabmessungen sind. Zusätzlich bestätigen die oben dargelegten Messungen die Homogenität der angemischten SVV Prüfkörper.

**Tab. 3.8** Ergebnisse der Ultraschalluntersuchung und die bestimmten Dichte des Prüfkörpers SVV276 bei zwei verschiedenen Abmessungen

| Abmessungen<br>[mm] | E-Modul (dynamisch)<br>[MPa] | v (dynamisch)<br>[1] | Dichte<br>[kg/dm <sup>3</sup> ] |
|---------------------|------------------------------|----------------------|---------------------------------|
| 90 x 180            | 14768                        | 0,301                | 1,72                            |
| 60 x 150            | 15047                        | 0,294                | 1,72                            |

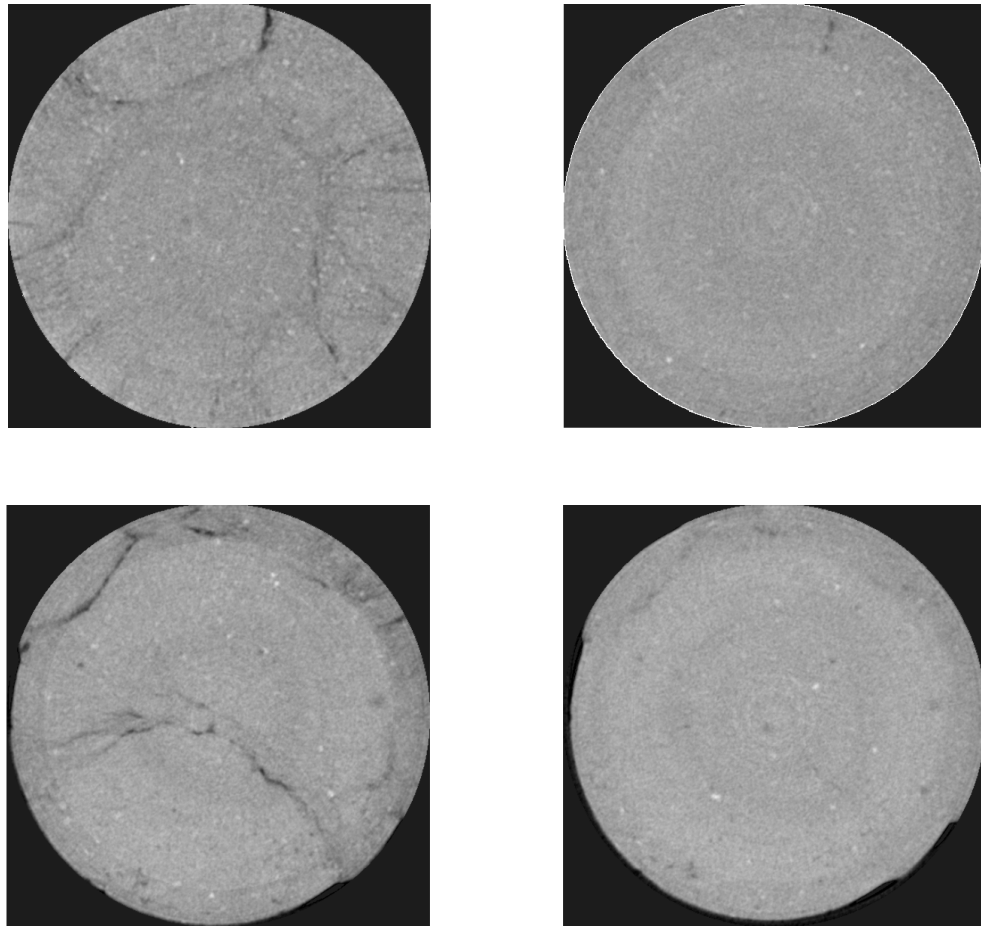
### 3.7.2 Röntgentomografieanalysen zum Gefügestand

Begleitend zu den Permeationsmessungen wurden die Prüfkörper röntgentomografisch durchstrahlt und die lokale räumliche Absorption gemessen. Näherungsweise ent-

spricht die Absorption der Dichte, wodurch Dichteveränderungen z. B. in Folge von Rissbildung visualisiert werden können und zwar ohne den Prüfkörper zu zerstören oder mechanisch zu verändern. Um die strukturelle bzw. texturelle Veränderung eines Prüfkörpers zu dokumentieren, wurden mehrere Aufnahmen gemacht und zwar üblicherweise eine Aufnahme des ungestörten Prüfkörpers vor dem Versuch, eine Aufnahme direkt nach der Schädigung und eine Aufnahme nach Ende des Versuchs. Für die Aufnahme des geschädigten Prüfkörpers musste der Prüfkörper aus dem Triaxialpermeameter ausgebaut und anschließend wieder eingebaut werden, wodurch die laufende Messung für 2 – 3 Tage unterbrochen wurde. Die Aufnahmen bestehen aus einzelnen Scheiben senkrecht zur Längsachse im Abstand von  $a = 0,2 \text{ mm}$  mit  $512 \times 512$  Bildpunkten. Hieraus folgt eine Auflösung von etwa  $0,12 \text{ mm}$  in der Ebene bzw. knapp  $3 \cdot 10^{-3} \text{ mm}^3$  im Volumen.

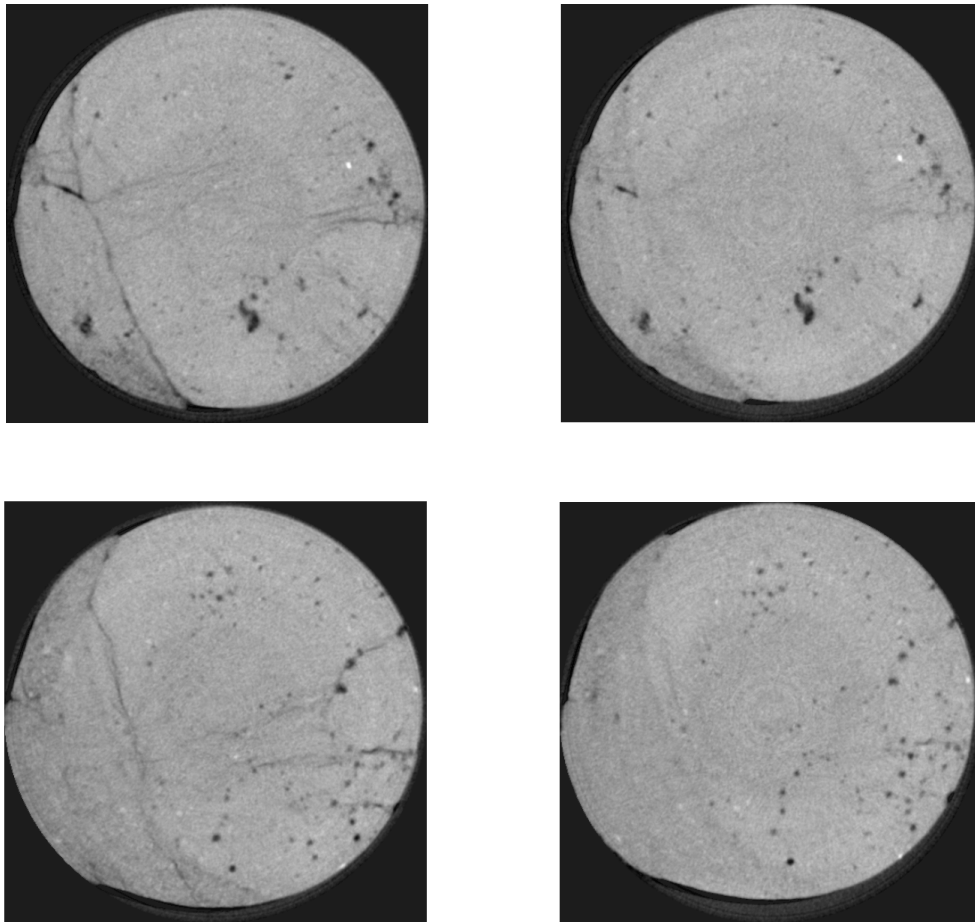
Die röntgentomografische Untersuchung zu den unterschiedlichen Zeitpunkten ist während der mechanisch hydraulischen Versuche an den Prüfkörpern SVV227, SVV228, SVV234 und SVV235 vorgenommen worden.

Abb. 3.38 zeigt exemplarisch Horizontalschnitte durch den Prüfkörper SVV235. Die oberen Aufnahmen sind in 66 mm Entfernung von der Endfläche und die unteren Aufnahmen in 92 mm Entfernung von der Endfläche lokalisiert. Die Aufnahmen auf der linken Seite sind direkt nach der Schädigung und die Aufnahmen auf der rechten Seite nach dem Ende des Versuches angefertigt worden. In den beiden linken Abbildungen sind deutlich die durch die deviatorische Belastung des Prüfkörpers in der Schädigungsphase entstandenen Risse zu erkennen. Im weiteren Versuchsverlauf wurde der Prüfkörper ca. 13 Tage lang auf einer Stirnseite mit NaCl-Lösung unter einem Druck von  $P_{fl} = 3 \text{ MPa}$  beaufschlagt und isostatisch mit  $\sigma_i = 4 \text{ MPa}$  belastet. Nach dieser Versuchsphase sind die Risse nicht mehr zu erkennen, vor allem der Prüfkörper im rechten oberen Bild ist als nicht geschädigt anzusehen. Somit dokumentieren diese Bilder sehr anschaulich den messtechnisch beobachteten Permeabilitätsrückgang als Folge einer Risschließung.



**Abb. 3.38** Horizontalschnitt durch den Prüfkörper SVV235 in (oben) 66 mm bzw. (unten) 92 mm Abstand von der Endfläche  
Die Aufnahmen links zeigen den Gefügezustand im Prüfkörper kurz nach der Schädigung, während aus den Aufnahmen rechts der Gefügezustand im Prüfkörper nach Versuchsende zu ersehen ist (ca. 13 Tage bei isostatischer Belastung mit  $\sigma_i = 4$  MPa und einer Durchströmung mit NaCl-Lsg.)

Auch bei Prüfkörper SVV227 zeigt sich diese Rissschließung (Abb. 3.39). Ein Vergleich der linken und rechten Bilder zeigt deutlich, dass sich nicht nur Makrorisse wieder schließen, sondern auch durch Scherbrüche bereichsweise abgetrennte Prüfkörperbruchstücke wieder zusammenwachsen. Da der Prüfkörper SVV227 nicht mit Lösung beaufschlagt wurde, ist diese Verheilung eher nicht als Folge eines chemischen Sekundärmineralisierungsprozesses anzusehen, sondern durch eine Umkristallisation unter mechanischer Belastung bedingt.



**Abb. 3.39** Horizontalschnitt durch Prüfkörper SVV227 in (oben) 52 mm bzw. (unten) 62 mm Abstand von der Endfläche

Die Aufnahmen links zeigen den Gefügestand im Prüfkörper kurz nach der Schädigung, während aus den Aufnahmen rechts der Gefügestand im Prüfkörper nach Versuchsende zu ersehen ist (ca. 6 Tage bei isostatischer Belastung mit  $\sigma_i = 4$  MPa und einer Durchströmung mit Stickstoff)

Die durch Anmischen hergestellten Prüfkörper bestehen folglich aus einem Material, das eine sehr geringe Durchlässigkeit aufweist und diese auch bei ausgeprägt deviatorischer Belastung und den dadurch resultierenden Verformungen beibehält. Erst bei Verzerrungen  $\varepsilon_1 > 10$  % entstehen Wegsamkeiten in Form von Rissen, die die Permeabilität des Materials signifikant vergrößern, sich jedoch bei veränderten Beanspruchungsbedingungen bereits bei isostatischen Belastungen von  $\sigma_i = 4$  MPa mit Porendrücken von  $\sigma_{fl} = 1 - 2$  MPa innerhalb von Tagen wieder schließen und so die geringe Durchlässigkeit des Materials wiederherstellen. Auch herstellungsbedingte Materialinhomogenitäten wie z. B. Poren oder Risse können auf diese Weise bei bereits relativ geringer mechanischer Beanspruchung geschlossen werden. Die durch



Anmischen hergestellten Prüfkörper weisen folglich den SVV als ein Material aus, dass aufgrund seiner Fähigkeit zur Rückbildung von Schädigungen und damit auch sekundären Wegsamkeiten bereits bei relativ geringen mechanischen isotropen Drücken eine gute Eignung für seinen Einsatz bei Verschlussbauwerken hinsichtlich des Erhalts der Permeabilität erwarten lässt. Diese Aussage gilt insbesondere für die unter den bei einem Einsatz als Verschlussmaterial bei der Bohrlochlagerung zu erwartenden Beanspruchungen. Hinzu kommt, dass auch herstellungsbedingte primäre Fehlstellen im Materialgefüge durch einen sich aufbauenden Kompaktionsdruck eliminiert werden.

### **3.8            Diskussion und Zusammenfassung**

Ziel dieses Kapitels war es die Grundlage für die Modellierung des mechanischen und hydraulischen Verhaltens des SVV durch laborative Untersuchungen an SVV-Prüfkörpern zu schaffen.

Bei der Prüfkörperherstellung hat sich gezeigt, dass dieser Herstellungsprozess unter Verwendung von gesättigter NaCl-Lösung wesentlich länger dauert als geplant und somit die Einhaltung des Zeitplans mit der ursprünglich geplanten Vorgehensweise nicht möglich ist. Zudem ist die mechanische Qualität der Prüfkörper bei dieser Vorgehensweise unzureichend. Um den Zeitplan in Grundzügen einhalten zu können und die mechanische Qualität der Prüfkörper zu verbessern, wurde von der TUC eine Anlage entwickelt und in Betrieb genommen, mit der bis zu 10 Prüfkörper simultan hergestellt werden können. Mit dieser Anlage hat die TUC die weiteren noch für die Versuche benötigten Prüfkörper hergestellt. Bei der GRS wurden in der Zwischenzeit Prüfkörper schwerpunktmäßig zur Untersuchung des C:HM-Verhaltens während des Aufsättigungsprozesses hergestellt und die für die Modellierung benötigten Messdaten aufgenommen.

Mit der von der TUC entwickelten Anlage wurden insgesamt knapp 50 Prüfkörper hergestellt, und der Herstellungsprozess wurde dabei sukzessive von anfänglich sehr inhomogenen und kavernen Prüfkörpern bis hin zu äußerlich sehr homogenen Prüfkörpern verbessert. Die triaxialen Kurzzeitversuche an 32 Prüfkörpern haben jedoch gezeigt, dass die mechanischen Parameter auch nach der Optimierung noch eine sehr große Streubreite aufweisen. Zudem wurde beobachtet, dass sich die Prüfkörper nach der Herstellung noch weiter ausdehnen und somit der Aushärtungsprozess noch nicht vollständig zum Erliegen gekommen ist. Da sowohl die großen Streubreiten als auch

die spätere Volumenausdehnung vermutlich auf Inhomogenitäten der Prüfkörper zurückzuführen sind, wurde vom Verfahren der Prüfkörperherstellung durch Aufsättigung Abstand genommen und stattdessen andere Verfahren ausgetestet mit dem Ziel, einen möglichst homogenen Prüfkörper herzustellen.

Bewährt hat sich hierbei ein Verfahren, bei dem der SVV und die entsprechende Menge an NaCl-Lösung innerhalb weniger Sekunden gemischt werden. Die auf diese Weise hergestellten Prüfkörper sind optisch homogen und weisen in den Kurzzeitversuchen deutlich geringere Streubreiten auf als die durch Aufsättigung hergestellten. Folglich wurde beschlossen, dass alle noch benötigten Prüfkörper durch Anmischen hergestellt werden.

An den durch Anmischen hergestellten Prüfkörpern wurden zunächst 11 triaxiale Kurzzeitversuche mit unterschiedlichen Manteldrücken durchgeführt und ein ähnliches Materialverhalten beobachtet wie bei Steinsalz. Mit diesen Messergebnissen als Grundlage wurde mit der Durchführung von 9 einaxialen Kriechversuchen begonnen, wobei sich gezeigt hat, dass die Prüfkörper die aufgegebenen Lasten überraschenderweise nicht ertragen. Daraufhin durchgeführte einaxiale Kurzzeitversuche haben bestätigt, dass die einaxiale Spitzenfestigkeit der angemischten SVV-Prüfkörper deutlich niedriger ist als erwartet.

Da bei einem Bohrlochverschlussmaterial im in-situ-Einsatz von einem seitlichen Stützdruck auszugehen ist, wurden ein triaxialer Kompressionsversuch und 3 triaxiale Kriechversuche durchgeführt. Bei den Kriechversuchen hat sich gezeigt, dass der SVV sich sehr stark kompaktiert und die anfängliche Kompaktionsphase mit einer Dauer von 5 Tagen nicht ausreichend war, um die Prüfkörper in hinreichendem Maße zu kompaktieren. Die Dauer der Laststufen mit knapp 40 Tagen war ebenfalls nicht ausreichend, um stationäre Verhältnisse zu erreichen. Insgesamt zeigen die Kriechversuche, dass das zeitabhängige Verhalten des SVV in erster Linie durch Kompaktion bestimmt wird und somit das Kriechen und die Kompression eher untergeordnete Bedeutungen haben.

Mit Messungen im Triaxialpermeameter an angemischten SVV-Prüfkörpern konnte ferner gezeigt werden, dass das Material gegenüber Stickstoff eine sehr geringe Durchlässigkeit von  $K < 10^{-21} \text{m}^2$  hat. Die Permeabilität bei Durchströmung mit NaCl-Lösung konnte aufgrund der etwa 100-mal längeren Messdauer, bedingt durch die etwa 100-mal größere Viskosität von NaCl-Lösung gegenüber Stickstoff, nicht an un-

geschädigtem SVV Material untersucht werden. Messungen an geschädigten Prüfkörpern haben jedoch gezeigt, dass die Permeabilität bei NaCl-Lösung als Fluid gegenüber Stickstoff geringer ist. Bei der Schädigung von SVV-Prüfkörpern hat sich herausgestellt, dass der SVV erst bei großen Verzerrungen ( $\varepsilon_1 > 10\%$ ) kurzfristig Permeabilitäten in der Größenordnung von  $\sim 10^{-16} \text{m}^2$  erreicht, diese jedoch trotz einer geringen isostatischen Belastung ( $\sigma_i = 4 \text{MPa}$ ) bereits innerhalb weniger Tage um mehr als eine Größenordnung abnehmen. Ursache für den beobachteten Rückgang der Permeabilität ist vermutlich die Kompaktion des Materials, die zu einer Schließung bzw. Verkleinerung der Wegsamkeiten führt.

Bestätigt wird dies durch röntgentomografische Aufnahmen, die begleitend zu den Versuchen aufgenommen wurden. Aufnahmen direkt nach der Schädigungsphase zeigen Risse und zum Teil sogar Scherflächen, die in den Prüfkörpern vorhanden sind. Die Aufnahmen nach Ende des Versuches weisen dagegen kaum noch Risse auf und zeigen, dass selbst abgetrennte Teile des Prüfkörpers wieder mit dem restlichen Prüfkörper verbunden werden.

Der bei den Triaxialpermeationsversuchen beobachtete Permeabilitätsrückgang bzw. die Riss-schließung in den Röntgentomografieaufnahmen belegen deutlich eine Art der Selbstverheilung des angemischten SVV-Materials. Diese Selbstverheilung findet jedoch auch bei konstantem Phasenbestand statt, ohne dass ein Zutritt von Lösung notwendig ist. Da durch die relativ homogene Vermischung weitere Phasenumwandlungen eher nicht zu erwarten sind, scheint dieser beobachtete Selbstverheilungsprozess rein mechanisch bedingt zu sein. Ob zusätzlich ein chemischer Verheilungsprozess stattfindet, konnte durch die Überlagerung mit dem mechanischen Prozess nicht festgestellt werden.



## **4            Physikalische Modellierung von SVV (angemischt)**

In diesem Kapitel wird die physikalische Modellierung der mechanischen und hydraulischen Eigenschaften vorgestellt. Dabei werden zunächst die verwendeten Stoffmodelle mit den entsprechenden Parametern erläutert. Anschließend wird auf die Ermittlung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung eingegangen.

### **4.1            Mechanisches Modell für SVV**

#### **4.1.1        Teilmodelle**

Da die Prüfkörper aus angemischtem SVV in den Laborversuchen im Grundsatz zunächst ein ähnliches Materialverhalten wie Steinsalz gezeigt haben, wurde versucht für die Beschreibung der mechanischen Eigenschaften die Stoffmodelle Hooke, LUBBY1, LUBBY2 und HOU/LUX heranzuziehen. Die Stoffmodelle LUBBY1 und Hooke sollten dabei verwendet werden, um das kurzfristige Materialverhalten von SVV zu beschreiben, z. B. Laständerungen bei Laborversuchen oder infolge von Ausbrüchen untertage. Für die Modellierung des Langzeitverhaltens, das entsprechend den Ergebnissen der Langzeitversuche durch ein ausgeprägtes Kriechverhalten gekennzeichnet ist und untertage bei längeren Standzeiten zu erwarten ist, erschien das Stoffmodell LUBBY2 als geeignet. Zur Charakterisierung der Schädigungsgrenze sollte der entsprechende Ansatz des Stoffmodells HOU/LUX herangezogen werden.

Bei der Ermittlung der Stoffmodellparameter und den Vorüberlegungen zur Simulation der Bohrlochlagerung hat sich gezeigt, dass das Kompaktionsverhalten des SVV in der Modellierung unmittelbar berücksichtigt werden muss. Eine nur mittelbare Berücksichtigung lässt nur wenig realistische Ergebnisse erwarten. Das Kompaktionsverhalten des SVV kann jedoch mit den Stoffmodellen Hooke, LUBBY1, LUBBY2 und HOU/LUX nicht zutreffend modelliert werden. Somit ist für den SVV von den obigen Stoffmodellen hier nur das Stoffmodell von Hooke verwendet worden. Für die Modellierung des Kompaktionsverhaltens ist das Stoffmodell Korthaus/Hein vorgegeben worden. Da die Stoffmodelle LUBBY1, LUBBY2 und der Schädigungsanteil des Stoffmodells HOU/LUX nicht in diesem Projekt verwendet wurden, die Ermittlung der Parameter jedoch formal korrekt durchgeführt worden ist und eine Verwendung der Parameter bzw. Stoffmodel-

le für andere Simulationen denkbar ist, ist die Ermittlung dieser Stoffmodellparameter im Anhang dokumentiert (Kap. 11.2).

#### **4.1.2 Das Stoffmodell Korthaus/Hein zur Beschreibung der zeitabhängigen Kompaktion**

Wie aus den Ergebnissen der Kriechversuche in Kap. 3.6 zu ersehen ist, erfolgt bei mechanischer Belastung eine signifikante Kompaktion des angemischten SVVs. Bei der Auswertung der Parameter für das Stoffmodell LUBBY2 (Kap. 11.2.2) hat sich gezeigt, dass der Anteil der Kompaktion an den Prüfkörperverzerrungen so groß ist, dass das Kriechverhalten des SVV eine eher untergeordnete Rolle spielt. Damit ist das Kompaktionsverhalten zwar dominant für den Deformationsprozess, kann aber mit dem Stoffmodell LUBBY2 aufgrund der vorausgesetzten Volumenkonstanz nicht wiedergegeben werden. Deshalb ist beschlossen worden, nunmehr mit dem Stoffmodell Korthaus/Hein eine gemeinsame Modellierung von Kompaktionsverformungen und den geringeren deviatorischen Verformungen durchzuführen. Demzufolge werden die Parameter für das Stoffmodell Korthaus/Hein so ermittelt, dass sie die gesamten im Versuch gemessenen Verzerrungen möglichst gut wiedergeben.

Da in [KOR 98] nicht auf die Vorgehensweise zur Ermittlung der Stoffmodellparameter des Stoffmodells Korthaus/Hein eingegangen wird, ist zur Ermittlung der Parameter ein Trial-and-error-Verfahren verwendet worden. In diesem Verfahren werden ausgehend zunächst von den angegebenen Materialparametern für Salzgrus die in den Laborversuchen gemessenen Verzerrungen nachgerechnet. Daraus ergibt sich eine mehr oder weniger gute Übereinstimmung. Im Anschluss werden die Materialparameter so lange variiert, bis eine möglichst gute Übereinstimmung zwischen den in den Laborversuchen gemessenen Axial- und Volumenverzerrungen und den numerisch bestimmten Axial- und Volumenverzerrungen vorliegt.

Im Rahmen der durchgeführten Variationsanalyse ist die beste Übereinstimmung mit den in Tab. 4.1 aufgelisteten Zahlenwerten erzielt worden.

Wie Abb. 4.1 zeigt, kann der Verlauf der Axialverzerrungen mit den ermittelten Parametern bis auf geringe Abweichungen abgebildet werden. Der Verlauf der gemessenen Volumenverzerrungen ist näherungsweise identisch mit dem der numerisch ermittelten Volumenverzerrungen (Abb. 4.2). Insgesamt bildet dieser Parametersatz das Material-

verhalten des SVV relativ gut ab, so dass er für eine näherungsweise Modellierung in hinreichendem Maße geeignet sein sollte.

**Tab. 4.1** Materialparameter für das Stoffmodell Korthaus/Hein für angemischten SVV und vergleichend für Salzgrus

| Parameter | Salzgrus | SVV       | Einheit  |
|-----------|----------|-----------|----------|
| A         | 0,094176 | 0,1799712 | [1]      |
| Q         | 54,21    | 54,21     | [kJ/mol] |
| Porosität | 0,5      | 0,15      | [1]      |
| a         | 0,01648  | 0,01648   | [1]      |
| b         | 0,9      | 0,5       | [1]      |
| c         | 0,1      | 0,003     | [1]      |
| d         | 0,0003   | 0,0003    | [1]      |
| m         | 2,25     | 0,8       | [1]      |
| T         | 295      | 295       | [K]      |

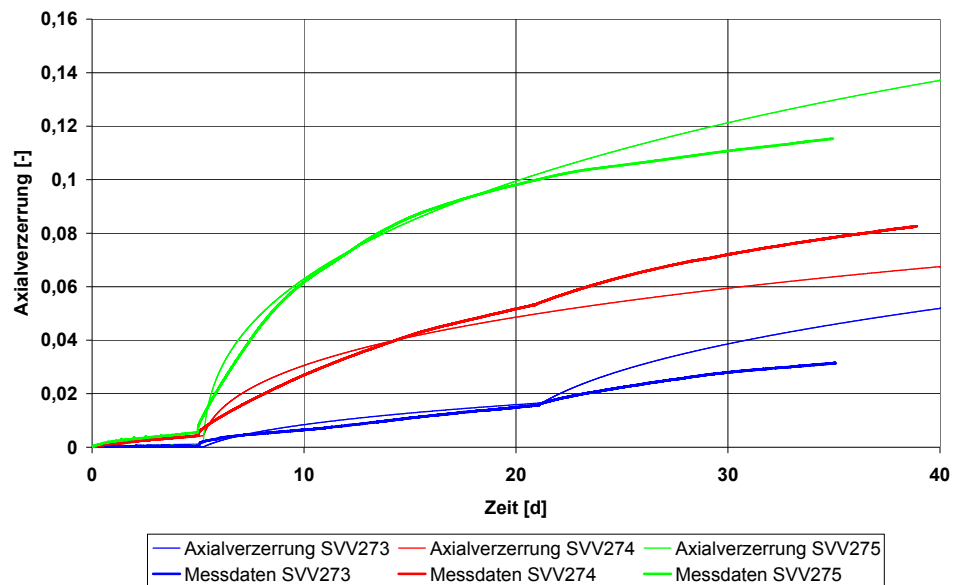
Damit folgt:

$$\dot{\epsilon}_{SVV} = 0,1799712 \cdot \exp\left(\frac{-54,21 \frac{kJ}{mol}}{R \cdot 295 K}\right) \cdot (h_1 \cdot p^2 + h_2 \cdot q^2)^2 \cdot \left(h_1 \cdot \frac{p}{3} \cdot 1 + h_2 \cdot S\right) \quad (4.1)$$

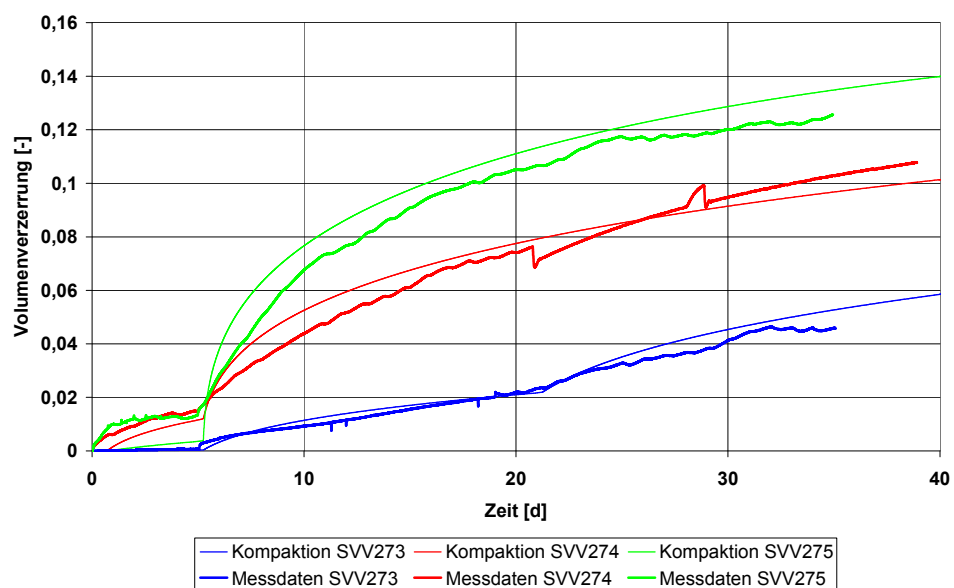
$$h_1(\eta) = \frac{0,01648}{\left(\frac{\left(\left(\frac{0,5}{\eta}\right)^{0,1} - 1\right)}{0,5^{0,1}} + 0,0003\right)^{0,8}} \quad (4.2)$$

$$h_2(\eta) = 0,5 \cdot h_1(\eta) + 1 \quad (4.3)$$

Mit p = Hauptnormalspannung [MPa], S = Deviatorischer Spannungstensor [MPa], q = Deviatorische Spannungsinvariante [MPa],  $\eta$  = Porosität [1], 1 = Einheitstensor [1] und R = Allgemeine Gaskonstante.



**Abb. 4.1** Gemessene und durch numerische Lösung der Stoffmodellgleichung ermittelte Axialverzerrungen der Versuche SVV273, SVV274 und SVV275, Materialparameter nach Tab. 11.3



**Abb. 4.2** Gemessene und durch numerische Lösung der Stoffmodellgleichung ermittelte Volumenverzerrungen der Versuche SVV273, SVV274 und SVV275, Materialparameter nach Tab. 11.3



## 4.2 Porositäts-Permeabilitätsmodell für SVV

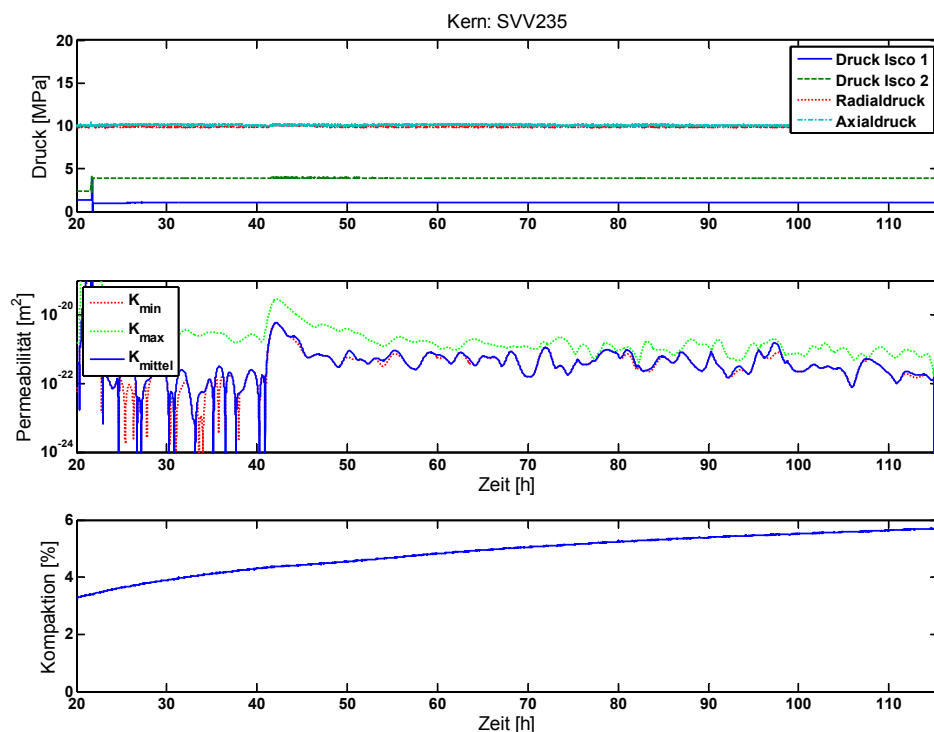
Für die Realisierung einer hydraulisch-mechanischen Kopplung bzw. für die Berechnung einer von der Beanspruchung des Gesteins abhängigen und damit sich im Laufe der Zeit ändernden Permeabilität müssen die mechanisch bedingten Veränderungen im Gesteinsgefüge, die mit der Permeabilität im Bezug stehen, quantifiziert werden. Grundsätzlich wird davon ausgegangen, dass die Permeabilität abhängt von der Porosität und von der mechanischen Beanspruchung. Dabei sind noch zu unterscheiden Gesamtporosität und effektive Porosität. Dieser Zusammenhang zwischen der effektiven Porosität und der Permeabilität wird üblicherweise in Form einer Potentialfunktion beschrieben.

Grundlage für die Ableitung einer Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung sind laborative Untersuchungen, bei denen ein Prüfkörper unterschiedlich stark belastet und für den aktuellen Belastungszustand dann die Permeabilität gemessen wird. Aus der durch die Belastung bedingten Volumenänderung kann bei bekannter Anfangsporosität die aktuelle belastungsabhängige Porosität bestimmt werden. Bei zyklischer Ent- und Wiederbelastung kann dieser Zusammenhang zwischen Permeabilität und Porosität wiederholt an einem Prüfkörper gemessen werden.

Von der Ableitung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung aus Kompressionsversuchen mit zyklischer Ent- und Wiederbelastung wurde jedoch im Fall des SVV Abstand genommen. Begründet wird diese Entscheidung damit, dass der SVV im in-situ-Einsatz nicht komprimiert wird (zeitunabhängige reversible Volumenverformung), sondern vorwiegend kompaktiert wird (zeitabhängige irreversible Volumenverformung). Ob und wie realistisch eine aus Kompressionsversuchen abgeleitete Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung die Permeabilitätsentwicklung beschreibt, ist somit fraglich. Folglich wurden die Triaxialpermeametermessungen aus Kap. 3.7.1 als Grundlage für die Ableitung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung verwendet. So erfolgte bei dem Versuch mit Prüfkörper SVV235 bei einer isostatischen Belastung von  $\sigma_i = 10 \text{ MPa}$  über mehrere Tage hinweg eine Kompaktion. Während dieses Versuches wurde kontinuierlich die Permeabilität gemessen (Abb. 4.3).

Da der Prüfkörper SVV235 eine sehr kleine Ausgangspermeabilität von  $K < 10^{-20} \text{ m}^2$  aufwies, war erst nach ca. 2 Tagen die Aufsättigung näherungsweise vollständig und eine Durchströmung unter stationären Verhältnissen gegeben. Auch danach wurden die Permeabilitätsmessungen dadurch beeinflusst, dass durch den zeitabhängigen

Kompaktionsprozess des SVV das Porenvolumen verändert und dadurch Fluid aus dem Prüfkörper ausgepresst wurde. Diese nicht idealen Bedingungen zeigen sich auch in der Streubreite der aus den Messungen abgeleiteten Permeabilitäten in Abb. 4.3. Hier weicht der Verlauf der maximalen Permeabilität (grün gestrichelte Kurve) vom Verlauf der berechneten mittleren Permeabilität (blaue Kurve) deutlich ab. Etwa über die ersten 40 h des Versuches sind die gemessenen Fließraten durch die Änderung des Porenvolumens und vor allem durch die Aufsättigung geprägt. Danach kann davon ausgegangen werden, dass auch die schwer zugänglichen Porenräume mit Fluid gefüllt sind und näherungsweise eine Durchströmung des Prüfkörpers erfolgt, die von der Änderung des Porenvolumens nur noch in einem geringen Maße überlagert wurde.



**Abb. 4.3** Ausschnitt aus den Messkurven des Versuches SVV235

Oben sind die Belastung und die Porendrücke an Ein- und Auslassseite, in der Mitte die Permeabilität mit Streubereich und unten die Kompaktion dargestellt.

Um aus dem Versuch die Verringerung der Permeabilität im Lauf des Kompaktionsprozesses abzuleiten, wurden die Messdaten durch eine Potenzfunktion der folgenden Form angenähert.

$$K = A \cdot n^B \quad (4.4)$$

mit  $n$  = Porosität [1],  $K$  = Permeabilität [ $m^2$ ],  $A$  = Parameter [ $m^2$ ] und  $B$  = Parameter [1].

Beachtet werden muss, dass der Prüfkörper bereits im Ausgangszustand eine Porosität  $\Phi_0 > 0$  aufweist, die anschließend durch die Kompaktion verringert wird. Da die Bestimmung der Ausgangsporosität des Prüfkörpers SVV235 zum damaligen Zeitpunkt aus technischen Gründen nicht möglich war und eine nachträgliche Bestimmung mittels einer Durchströmung mit NaCl-Lösung keinen Bezug zur ursprünglichen Porosität hat, wurde die Anfangsporosität aus den zur Prüfkörperherstellung verwendeten Lösungs- und SVV-Massen sowie der Dichte des Prüfkörpers rechnerisch abgeschätzt. Ausgehend von einer homogenen Mischung, die durch die Vermischung von SVV und NaCl-Lösung relativ gut gewährleistet sein sollte, kann berechnet werden, dass der Prüfkörper zu 30,63 % aus Kieserit, zu 59,83 % aus Starkeyit und zu 9,54 % aus Halit besteht. Ein porenfreier Prüfkörper mit dieser Zusammensetzung müsste eine Dichte von  $\rho = 2,134 \text{ kg/dm}^3$  aufweisen. Die tatsächliche Dichte des Prüfkörpers SVV235 liegt jedoch bei nur  $\rho = 1,908 \text{ kg/dm}^3$ . Aus diesem Dichteunterschied kann eine Porosität von  $\Phi_0 = 10,58 \%$  berechnet werden. Mit dieser Porosität wurden für die Parameter in Gleichung (4.4) für den angemischten SVV folgende Zahlenwerte ermittelt:

$$A = 5,7925 \cdot 10^{-25} m^2,$$
$$B = 3,8781$$

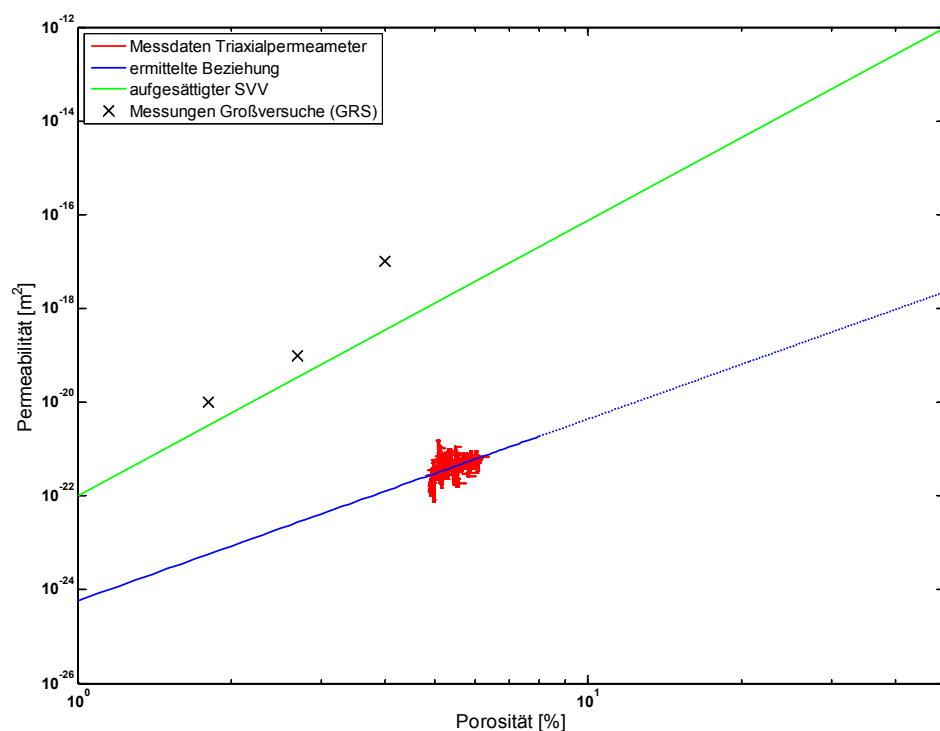
Damit gilt für die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung:

$$K = 5,7925 \cdot 10^{-25} \cdot n^{3,8781} m^2 \quad (4.5)$$

Anmerkung: Vorstehende Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung ist aus einem Versuch mit sehr genauer Messung der Permeabilität entwickelt worden, hat jedoch trotzdem einen eher nur hypothetischen Charakter, da für die Ableitung dieser Beziehung nur ein einziger Laborversuch herangezogen worden ist. Somit besteht die Möglichkeit, dass der vermessene SVV-Prüfkörper mit seiner Permeabilität auch am Rand der Streubreite bzw. im eher unwahrscheinlichen Fall eines nicht repräsentativen Prüfkörpers sogar auch außerhalb der Streubreite liegt. Die aus den Messbefunden ermittelte Beziehung wäre damit ebenfalls nicht repräsentativ. Da weiterführende Versuche aus Zeitgründen nicht möglich waren und die vorgenommenen Messungen am Prüfkörper SVV235 gut mit den Messungen an den anderen Prüfkörpern übereinstimmen, wird im Folgenden davon ausgegangen, dass der Prüfkörper SVV235 repräsentativ für die

angemischten SVV Prüfkörper ist. Die vorstehende Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung wird daher in Form einer Arbeitshypothese für die weiteren Betrachtungen und Analysen verwendet.

Deutlich ist in Abb. 4.4 zu erkennen, dass der Prüfkörper aus angemischtem SVV eine geringere Permeabilität aufweist als sie mit den aufgesättigten Prüfkörpern oder in den Versuchen von der GRS mit Großprüfkörpern gemessen wurde. In Anbetracht der Tatsache, dass die angemischten Prüfkörper deutlich homogener sind und keine bevorzugten Fließpfade aufweisen, erscheint dieser Befund auch plausibel.



**Abb. 4.4** Gegenüberstellung der aus den Triaxialpermeametermessungen abgeleiteten Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung  
Mit Messwerten, Labormesswerten von der GRS an Großbohrkernen und logarithmisch linearer Näherung für aufgesättigten SVV (ausgehend von wasserfreiem SVV mit  $\Phi = 50 \%$ ,  $K = 10^{-12} \text{ m}^2$  und Messungen an aufgesättigten SVV-Prüfkörpern mit  $\Phi = 1 \%$ ,  $10^{-22} \text{ m}^2$ )

Bei größeren Porositäten scheint die Beziehung Gleichung (4.5) nicht mehr in der Lage zu sein, die Realität ausreichend zu beschreiben. So weist der angemischte SVV bei einer Porosität von  $\Phi = 50 \%$  nach Gleichung (4.5) immer noch eine Permeabilität von nur  $K \approx 10^{-18} \text{ m}^2$  auf und wäre damit als sehr gering permeabel anzusehen. Es ist dem-

nach wahrscheinlich, dass hin zu größeren Porositäten die Permeabilität nicht mehr nur logarithmisch linear, sondern noch stärker ansteigt. Für dieses Projekt ergibt sich hieraus allerdings keine Relevanz, da der angemischte und als Verschlussmaterial eingesetzte SVV nur kompaktiert wird und sich die Porosität von der Anfangsporosität ausgehend somit nur verringert und nicht erhöht. Eine Erhöhung der Porosität wäre nur bei einer Schädigung des SVV zu erwarten, die jedoch aufgrund der auch wirksamen und mechanisch bedingten Schädigungsrückbildungsprozesse (Selbstverheilung) wenn überhaupt, dann doch eher nur kurzfristig möglich ist.

#### **4.3 Diskussion und Zusammenfassung**

Bei der Auswertung der Kurzzeitversuche konnte ein ähnliches Materialverhalten wie bei Steinsalz beobachtet werden. Deshalb sind analog zu Steinsalz zunächst Stoffmodellparameter für die Stoffmodelle LUBBY1, LUBBY2 und HOU/LUX bestimmt worden. Es hat sich jedoch gezeigt, dass das Materialverhalten des SVVs im Hinblick auf seinen Einsatz als Bohrlochverschluss in erster Linie durch ein ausgeprägtes Kompaktionsverhalten bestimmt ist. Folglich wurde von den Stoffmodellen LUBBY1, LUBBY2 und HOU/LUX für die Simulation der axial gelochten Prüfkörper und der Bohrlochlagerung Abstand genommen. Da für andere Berechnungen grundsätzlich die Möglichkeit besteht, dass diese Stoffmodelle mit den ermittelten Parametern Verwendung finden könnten, ist die Parameterermittlung im Anhang in Kap. 11.2 aufgeführt. Für die nachfolgenden Berechnungen wird das Stoffmodell KORTHAUS/HEIN verwendet, für welches in obigem Kapitel Parameter im Trial-and-error-Verfahren ermittelt werden konnten. Die Nachrechnung der Laborversuche mit den ermittelten Parametern zeigt lediglich leichte Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Volumenverzerrungen und ist in der Lage, die Axialverzerrungen sehr gut abzubilden, so dass das Stoffmodell mit den ermittelten Parametern für eine Modellierung in hinreichendem Maße geeignet sein sollte.

Zur Ermittlung einer Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung wurden nicht wie ursprünglich geplant Kompressionsversuche mit zyklischer Ent- und Wiederbelastung herangezogen, da das Kompressionsvermögen gegenüber dem Kompaktionsvermögen bei angemischtem SVV vernachlässigbar erscheint. Folglich wurde beschlossen, eine Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung aus Triaxialpermeationsversuchen abzuleiten. In diesen Versuchen fand eine signifikante Kompaktion mit gleichzeitigem Rückgang der Permeabilität statt. Aus den gemessenen Verläufen der Porosität und der Permeabilität

konnte ein mathematischer Zusammenhang zwischen Porosität und Permeabilität bestimmt werden.

## 5 Modellierung des Aufsättigungsprozesses von SVV

Das SVV-Material soll als Abdichtungsmaterial im Rahmen von Bohrlochverschlüssen eingesetzt werden. Im Fall des Trockeneinbaus mit Aufsättigung vor Ort bzw. des Nasseinbaus als pastöser Dickstoff werden nach Einbau/Bewässerung bzw. nach Einbau vor Ort chemische Reaktionen induziert, die einerseits neben der Einbauart die mechanisch-hydraulischen Eigenschaften des Versatzmaterials bestimmen, andererseits zu mechanischen Einwirkungen auf das Gebirge führen. Für die gekoppelte Simulation des C:HM-Verhaltens von SVV muss ein geomechanisches FEM/FDM-Programm u. a. folgende Voraussetzungen erfüllen:

- Stoffmodell für Steinsalz (Simulation der Ausbildung einer konturnahen Auflockerungszone mit Schädigungsentwicklung und Rückbildung der Schädigungen)
- Stoffmodell für SVV (mechanisch-hydraulische Eigenschaften in der Aushärtungs- und Nachaushärtungsphase, Kristallisationsdruckentwicklung)
- Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für SVV (Aufsättigungsphase / Nachaushärtungsphase)
- Schnittstelle zu einem geochemischen Programm (z. B. EQLink) zur Kopplung geochemischer und mechanisch-hydraulischer Prozesse mit Identifizierung von Kopplungsparametern

Grundsätzlich soll eine vornehmlich einseitig geprägte chemisch→hydraulisch-mechanische Kopplung erarbeitet werden.

Als geomechanisches Programm ist im Rahmen der Vorhabensplanung das FEM-Programm MISES3 ausgewählt worden. MISES3 ist ein Programm zur computergestützten Analyse insbesondere untertägiger Tragwerke nach der Methode der Finiten Elemente. Dieses Programm ist in einer ersten Version bereits 1976 der Fachöffentlichkeit vorgestellt worden. Seither ist das Programm beständig weiterentwickelt worden. Durch fachbezogene umfangreiche eigene Erweiterungen hat sich MISES3 zu einer bei der Bearbeitung von Aufgaben auf dem Gebiet der Geomechanik bevorzugt angewendeten Simulationssoftware an der Professur für Deponietechnik und Geomechanik entwickelt.

Das Stoffmodell HOU/LUX wurde ohne Verheilungsansatz schon im Rahmen des BMBF-Forschungsvorhabens 02 C 0588 in das FEM-Programm MISES3 implementiert und anhand von Versuchsergebnissen im Labor wie auch anhand von Untersuchungsbefunden in situ validiert, [HOU 00] und [LUX 06] Im BMBF-Forschungsvorhaben 02 C 0720 ist in das FEM-Programm MISES3 das erweiterte Stoffmodell HOU/LUX mit einem Schädigungs- und Verheilungsansatz implementiert worden, womit die Voraussetzung zur Simulation der Ausbildung von Auflockerungszonen inklusive ihrer Rückbildung (Verheilung) gegeben ist.

Die Implementierung eines Stoffmodells für SVV und einer Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung sollte für SVV im Grundsatz gleich verlaufen wie die Implementierung des Stoffmodells HOU/LUX bzw. der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für Steinsalz.

MISES3 ist zum großen Teil in Fortran95 programmiert und somit zu EQLink kompatibel, das in Fortran77 geschrieben ist. Der Versionsunterschied bereitet keine programmtechnischen Probleme, da Fortran95 zu Fortran77 abwärtskompatibel ist und somit MISES3 kompatibel mit dem älteren Quellcode EQLINK haben sollte.

Somit erfüllt MISES3 vom programmtechnischen Standpunkt aus betrachtet die Voraussetzungen, um dieses Projekt durchzuführen.

## **5.1            Entwicklung einer Schnittstelle zwischen MISES3 und EQLink (ChemApp) und Implementierung dieses Programmpakets in MISES3**

### **5.1.1        Grundsätzliche Informationen zu EQLink und ChemApp**

ChemApp ist eine Programmierbibliothek, die aus einem umfassenden Set aus Subroutinen besteht. Diese erlauben es, in eigenen Programmen thermodynamische Gleichgewichtsberechnungen zu definieren, durchzuführen und die Ergebnisse auszuwerten. ChemApp erlaubt die Berechnung von komplexen Vielkomponenten- und Vielphasengleichgewichten in der Chemie. ChemApp wird in Form einer Dynamic Link Library (DLL) ausgeliefert. Entwickelt wurde ChemApp von Gunnar Eriksson, teilweise basierend auf seiner Arbeit im Rahmen eines europäischen Forschungsprojektes und seiner Tätigkeit am Lehrstuhl für Theoretische Hüttenkunde an der RWTH Aachen, z. B. [ERI 94], [ERI 95], [ERI 97]. In diesem Projekt sind mit ChemApp die geochemischen Berechnungen anfänglich in der Version 5.3.2 begonnen und dann aufgrund



eines Programmfehlers in dieser Version mit der Version 5.4.4 fortgeführt worden, in der dieser Fehler ausgebessert worden ist.

Das Programm EQLink ist eine Schnittstelle, die von der GRS entwickelt und zur Verfügung gestellt wurde. EQLink vermittelt die Kommunikation zwischen einem aufrufenden Programm und CHEMAPP. Für die hier vorgestellten Berechnungen wurde die in Fortran77 geschriebene Version 3.5.6 von EQLink verwendet. Weitere Informationen können [MOO 07] entnommen werden.

### **5.1.2 Implementierung von EQLink in MISES3**

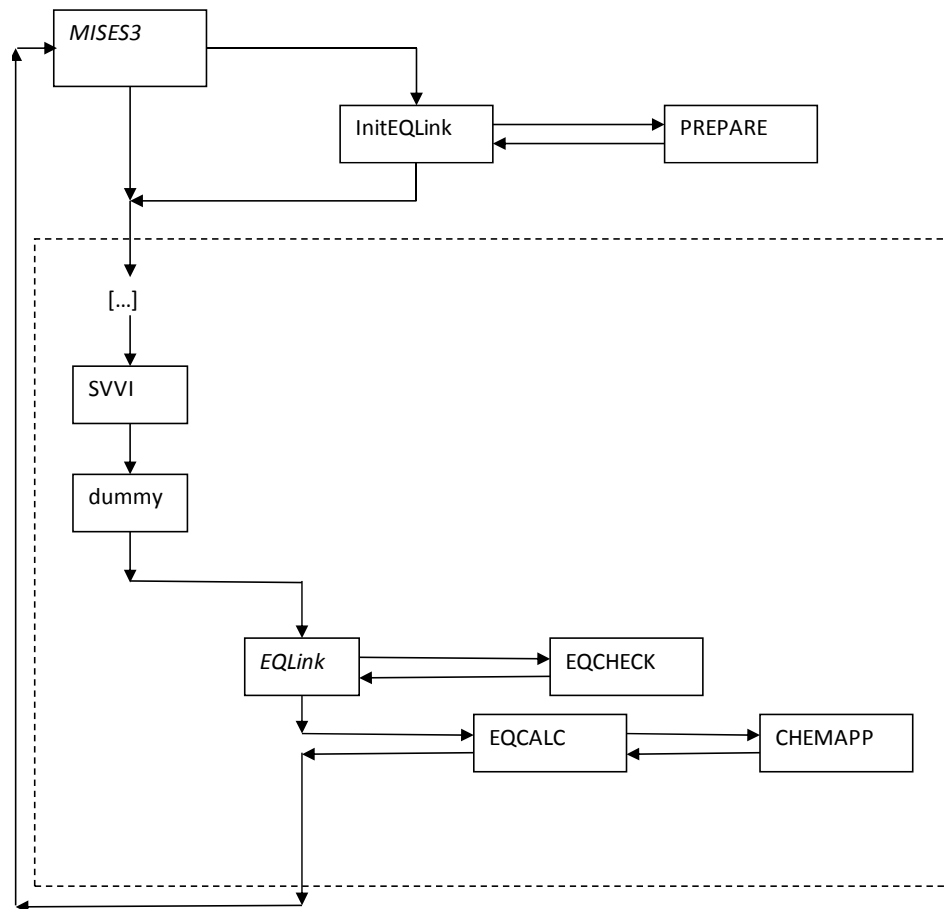
In Abb. 5.1 ist die Kopplung von EQLink mit MISES3 schematisch abgebildet. Aus MISES3 heraus wird die Subroutine InitEQLink aufgerufen, die die Namen der Systemkomponenten in dem Array SCNAME und deren Anzahl in der Variable NSCOM übergibt. Zusätzlich werden der Ausgabekanal für EQLink und dessen Subroutinen, der Verbosity-level und der Commonblock memEQLINK, definiert. Über den zugewiesenen Wert des Verbosity-levels kann die Ausgabe von Fehlermeldungen gesteuert werden:

Ferner werden über die Subroutine PREPARE alle Variablen initialisiert, die für die Berechnungen mit EQLink benötigt werden, und es wird die Parameterdatei eingelesen. Als Parameterdatei wurde die Datei `grs88#1-0_NaKMgCaClSCN_ypf.dat` verwendet. Diese enthält folgende Elemente:

- die freien Gibbs-Energien für die verschiedenen Elemente,
- das Molvolumen (genauer gesagt, die Wirkung auf das Molvolumen, d. h. bei Volumenverkleinerung ein negativer Zahlenwert),
- die Temperaturabhängigkeitsfunktion,
- die Pitzer Parameter und
- die Phasen, die sich bilden können.

Diese Schritte sind notwendig, um ChemApp zu initialisieren und somit die Vorbereitungen für die chemischen Berechnungen in den einzelnen Zonen zu treffen (Anmerkung: Für die mathematischen Elemente der FEM-Berechnung wird der Begriff Zonen verwendet, um eine Verwechslung zwischen chemischen und mathematischen Elementen zu vermeiden). Die Initialisierung wird vor dem ersten Zeitschritt durchgeführt,

sodass sie nicht für jede einzelne von MISES3 durchlaufene Zone wiederholt werden muss und die Berechnungen nicht unnötig in die Länge gezogen werden.



**Abb. 5.1** Schematische Darstellung der Kopplung von EQLink an MISES3

Die Initialisierung und der Aufruf von ChemApp in MISES3 erfolgt über die Quellcode – Datei msalre.f des FEM-Programms MISES3. Dazu werden die EQLink-Headerdateien parameterfile.h und ioEQLINK.h aufgerufen und die folgenden zusätzlichen Variablen eingeführt:

- fdb: Dateiname der Parameterdatei,
- rho\_Loesung: Dichte der Lösung [ $\text{kg/m}^3$ ],
- Gehalt\_NaCl: NaCl-Masse pro  $\text{m}^3$  Lösung [kg],
- ib\_ges, il\_ges: Matrizen mit den Werten der Arrays il und ib, dem Elementbestand der flüssigen (il) und festen (ib) Phase (nur für Debugzwecke),

- `i_H2O`, `i_Mg`, `i_SO4`, `i_H`, `i_Na`, `i_Cl`, `i_N2`, `i_O`, `i_K`, `i_Ca`, `i_S`, `i_C`, `i_N`, `i_H2O_ph`: Systemkomponentenindices für Wasserstoff, Sauerstoff, usw. Es sind Variablen sowohl für Elemente wie auch für Spezies angelegt, um entweder Elemente oder Spezies als Basis für die Berechnungen verwenden zu können (Anm.: Unter Spezies werden in der Chemie obligatorisch im Gleichgewicht miteinander auftretende Dissoziations- oder Redox-Stufen derselben Substanz verstanden. Z. B. sind  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Mg}$  und  $\text{SO}_4$  Spezies der SVV-Hydrate Kieserit, Starkeit, ...),
- `i_H2O_ph`: Phasenindex für Wasser, üblicherweise 2,
- `tmp`: temporäre Integer Variable für den Status von ChemApp Ladebefehlen,
- `eqlinkchannel`: Ausgabekanal für EQLink und
- `verbosity`: Verbosity-level.

Da MISES3 die zonenbasierten Variablen in Dateien speichert, mussten die vorhandenen Dateien um die oben aufgeführten zonenabhängigen Variablen erweitert werden. Beim Aufruf von `InitEQLink` werden auch die Anfangsmassen der verschiedenen Spezies bzw. Elemente für die einzelnen Zonen festgelegt.

Beim Durchlaufen der einzelnen Gaußpunkte wird vor dem Aufruf von der Subroutine `SVVI` der vorgegebene zeitabhängige Zutritt von Lösung in die Zone(n) berechnet, und die Phasenmassen der einzelnen Zonen werden entsprechend angepasst. Zum Schluss werden die Ergebnisse der Berechnung in einer Datei abgespeichert.

Die Subroutine `SVVI` enthält das Stoffmodell, welches das mechanische Materialverhalten des SVV auf Grundlage der Ergebnisse der Berechnungen von `EQLink` beschreiben soll. Da dieses Stoffmodell noch nicht entwickelt ist, hilft hier eine Subroutine als Platzhalter aus, die ähnlich der Subroutine des Stoffmodells `HOU/LUX` gestaltet ist, so dass im weiteren Verlauf die Möglichkeit besteht, Befehle aus der Subroutine des Stoffmodells `HOU/LUX` in die Subroutine `SVVI` zu übernehmen. Vor dem Stoffmodell wird die Subroutine `dummy` aufgerufen, die dann die eigentliche Schnittstelle zwischen Chemie und Mechanik ist.

In der Subroutine `dummy` wird `EQLink` aufgerufen und die von `EQLink` zurückgegebenen Daten für die aufrufende Subroutine aufbereitet. So werden z. B. aus dem von `EQLink` berechneten Gesamtvolumen die resultierenden Verformungen und daraus ein Quelldruck berechnet. Die Berechnung des Hydratisierungsgrades soll ebenfalls in der Subroutine `dummy` erfolgen, jedoch konnte bisher aufgrund der verfügbaren sehr in-

konsistenten laborativen Befunde kein geeigneter Ansatz zur Beschreibung dieses Prozesses gefunden werden (siehe Kap. 5.1.5).

Der Aufruf von EQLink erfolgt durch folgenden Befehl:

```
SUBROUTINE EQLINK  
  
*   (iSys,Time,molH2O_in,ig,SysP_in,SysVol_in,SysTemp,  
*   igelim,option,molH2O_out,igas,il,scomconc,ib,EQ,  
*   SysP_out, SysVol_out,PVol,PMass,PMol,solidsvol,pH,calctime,  
*   eqerr)
```

Die interne Funktionsweise von EQLink steht in Verantwortung des Projektpartners GRS, so dass EQLINK hier als Black Box behandelt wird. Daher wird an dieser Stelle nur auf die im Rahmen der Kopplung erforderlichen bzw. gelieferten Ein- und Ausgabedaten von EQLink eingegangen.

(a) Eingabeparameter:

- iSys: Zonennummer bzw. Gaußpunktnummer
- Time: Zeitschritt der aufrufenden Subroutine [ – ] Hinweis: Diese Zeit ist in EQLink rein fiktiv und geht nicht in Berechnungen mit ein, da in ChemApp keine Zeit definiert ist
- molH2O\_in: Wassermasse vor der Berechnung des thermodynamischen Gleichgewichts [mol]
- ig: Array mit dem gesamten Bestand an Elementen aller Phasen [mol]
- SysP\_in: Systemdruck [Pa]
- SysVol\_in: Gesamtvolumen für die Berechnung. 0 bedeutet, dass das Volumen nicht festgesetzt ist [m<sup>3</sup>]
- SysTemp: Temperatur des Systems [K]
- Igelim: Maximale Differenz zwischen max(ig) und min(ig). Liegt die Differenz über einem zugewiesenen Wert, wird die entsprechende Systemkomponente nicht in der Rechnung berücksichtigt. Der Zahlenwert liegt üblicherweise in der Größenordnung von 10<sup>-14</sup>
- Option: Vektor für spezielle Optionen; z. B. wird hier definitorisch vorgegeben, dass sich in den Berechnungen keine Gasphase bildet.

Da für die Berechnungen mit MISES3 keine Gasphase berücksichtigt wird, ist die Berechnung eines Zielvolumens laut H. Moog nicht ratsam, da die Gasphase als Puffer wirkt, ohne den sich sehr schnell außerordentlich hohe Drücke bilden können, die in der Realität nicht auftreten und zu instabilen Berechnungen führen.

(b)   Ausgabeparameter:

- molH2O\_out: Berechnete bzw. extrapolierte Wassermasse [mol]
- igas: Vektor mit dem Gesamtinventar der Gasphase
- il: Vektor mit dem Gesamtinventar der flüssigen Phase
- ib: Vektor mit dem Gesamtinventar der festen Phase
- scomconc: Vektor mit der Wassermasse und den Konzentrationen der Systemkomponenten
- EQ: Dreidimensionale Matrix, die alle Gleichgewichtsdaten für alle Phasen speichert
- SysP\_out: Berechneter Systemdruck [Pa]
- SysVol\_out: Berechnetes Systemvolumen [m<sup>3</sup>]
- PVol: Vektor mit dem Volumen aller Phasen. PVol(1)=gas, PVol(2)=flüssig, PVol(3...NPHAS)=alle anderen (festen) Phasen
- PMass: Vektor mit den Massen aller Phasen
- Solidsvol: Gesamtvolumen aller festen Phasen
- pH: Berechneter pH-Wert
- calctime: Rechenzeit für die Berechnung des Gleichgewichts [s]
- eqerr: Integervariable, die in codierter Form einen Fehlervektor enthält.

Anzumerken ist an dieser Stelle, dass mit der verfügbaren Software prinzipiell über das thermodynamische Gleichgewicht verschiedener, mengenmäßig definierter Elemente bzw. Spezies die in einem vorgegebenen Volumen entstehenden Mineralphasen berechnet werden können und auch der Kristallisationsdruck berechnet werden kann. Diese Berechnung ist jedoch problematisch, wenn ohne Gasphase gerechnet wird. Auf die Mitmodellierung einer Gasphase wurde für diese Berechnungen allerdings bewusst verzichtet, da MISES3 die Berechnung eines 2-Phasen-Flusses nicht unterstützt und

die Versuchsdurchführung so optimiert ist, dass bei der Aufsättigung der größte Teil der vorhandenen Luft entweichen kann und somit die Gasphase beim Aufsättigungsprozess zu vernachlässigen sein sollte. Möglich wäre lediglich, in den Berechnungen mit CHEMAPP eine Gasphase vorzugeben, die in den Transportrechnungen dann nicht berücksichtigt wird. Die Menge der vorgegebenen Gasphase müsste hierbei jedoch geschätzt werden und wäre über alle Berechnungen hinweg konstant, was in der Realität nicht der Fall ist. Inwieweit die auf diese Weise erhaltenen Berechnungsergebnisse realistisch sind, ist somit unbekannt, und zudem dauert die Berechnung unter konstantem Volumen länger als unter konstantem Druck.

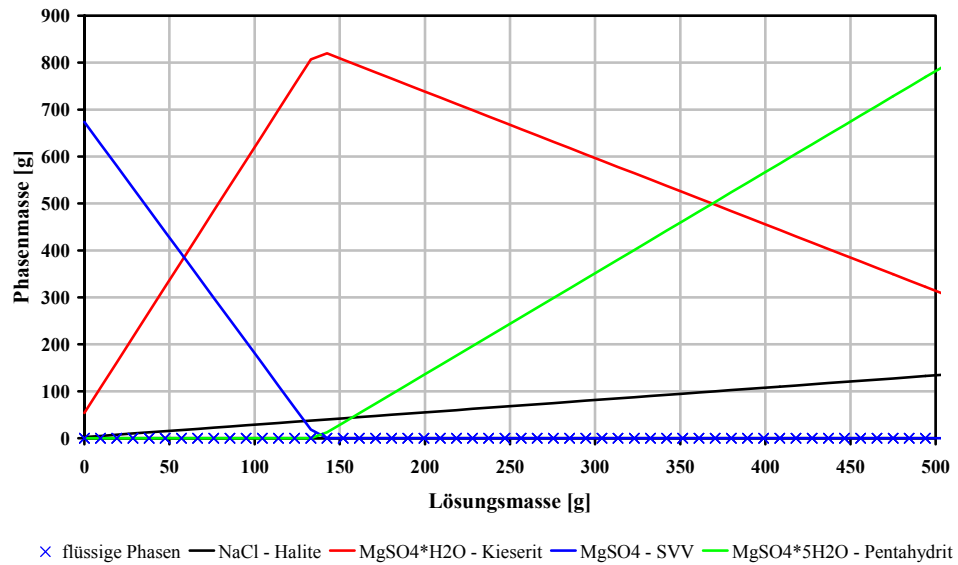
Bei der Weiterentwicklung von MISES3 wurde darauf geachtet, dass der ursprüngliche Berechnungsablauf und der damit verbundene Datenfluss beibehalten und nicht verändert wurden und dass bei der Implementierung der neuen Stoffmodelle und der Ankopplung von EQLink bzw. bei der Verarbeitung der zugehörigen Ergebnisdaten alle neu eingerichteten Dateien nach der MISES3-orientierten Struktur aufgebaut worden sind.

### **5.1.3 Simulation einer idealen homogenen Aufsättigung**

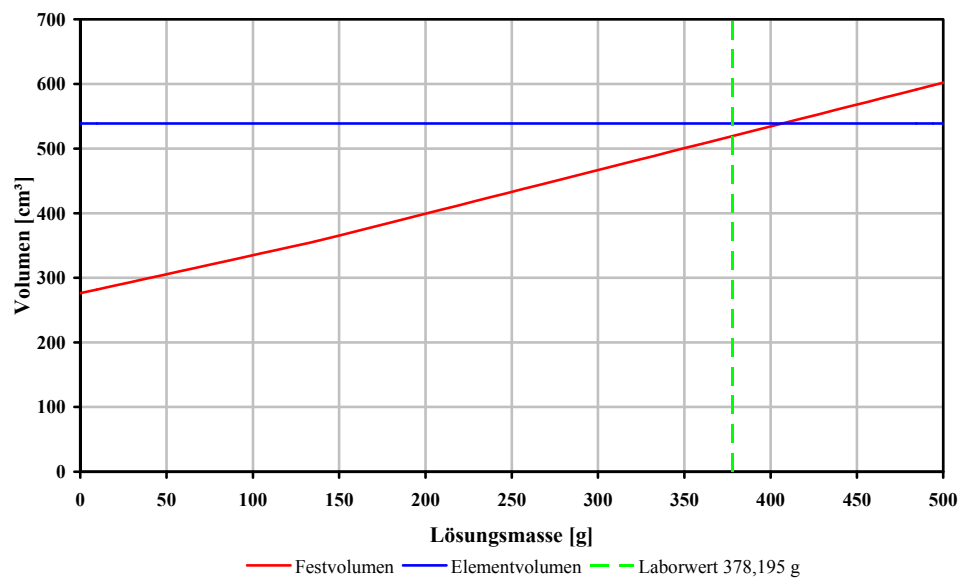
Die Prüfkörperherstellung zeigt, dass die druckunterstützte künstliche Aufsättigung bereits innerhalb von einigen wenigen Stunden zu einem sehr großen Teil abgeschlossen ist, der Prüfkörper jedoch etwa einen Monat benötigt, um weitgehend auszuhärten. Aufgrund dieser Fakten liegt nahe, zunächst davon auszugehen, dass sich die zugeführte NaCl-Lösung aufgrund der hohen Anfangsporosität von 50 % homogen im SVV-Material verteilt und zwar so schnell (= theoretisch momentan), dass die chemischen Prozesse während des tatsächlich inhomogen ablaufenden Aufsättigungsprozesses vernachlässigt werden können. Unter diesen Randbedingungen wurde eine chemische Simulation des Aufsättigungsprozesses zunächst mit einem Dummy-Programm und EQLink, anschließend mit MISES3 und EQLink, aber ohne Kopplung zur Hydraulik bzw. Mechanik, durchgeführt. Die Ergebnisse beider Berechnungen sind identisch. Als Modell wurde eine einzige quadratische Zone verwendet, da bei diesem Ansatz die chemischen Prozesse ohne mechanische oder hydraulische Kopplung in allen Zonen gleich ablaufen und somit die Betrachtung einer einzigen repräsentativen Zone ausreicht. Die Ergebnisse können dann auf ein ganzes System, z. B. einen Prüfkörper, übertragen werden.

Mit dieser starken Idealisierung wird z. B. die Herstellung eines Prüfkörpers aus SVV simuliert. Dazu wird in die Zone mit dem Volumen eines Prüfkörpers zu der im Labor verwendete Menge  $\text{MgSO}_4$  in mehreren Schritten gesättigte  $\text{NaCl}$ -Lösung hinzu gegeben. Das Ergebnis ist in Abb. 5.2 zu sehen: Als erstes verbinden sich das Wasser und  $\text{MgSO}_4$  zu Kieserit ( $\text{MgSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ) und zwar solange, bis ab ca. 150 g zugeführter Lösung die Wassermenge so groß wird, dass jedes  $\text{MgSO}_4$ -Molekül ein  $\text{H}_2\text{O}$ -Molekül gebunden hat und die Umwandlung von Kieserit in Pentahydrat ( $\text{MgSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ) beginnt. Deutlich zu sehen ist auch die lineare Zunahme von  $\text{NaCl}$ , das bei der Reaktion nicht verbraucht wird, aber auch nicht mehr in Lösung bleiben kann, da das verfügbare Wasser jeweils vollständig gebunden wird. Hier ist bereits erkennbar, dass durch die Bildung von Kieserit und die anschließende Umwandlung in Pentahydrat der Hydratationsgrad nicht nach der Definition, wie sie z. B. in der Literatur für Beton verwendet wird, berechnet werden kann. Begründung: Zum Ende der Simulation besteht der SVV-Versatz aus einer Mischung aus Kieserit und Pentahydrat und hat durchschnittlich 2,4 Wassermoleküle pro Sulfatmolekül gebunden. Er ist damit allerdings noch lange nicht komplett hydratisiert. Somit erreicht das Verhältnis aus der gebundenen Lösungsmenge zur Gesamtmenge an Lösung, die gebunden werden könnte, mit dem in der Literatur üblicherweise der Hydratationsgrad definiert wird, z. B. [HES 00], maximal nur den Wert 0,34 und nicht den Wert 1,0, der einen ausgehärteten Zustand indiziert. Nach dieser Definition könnte dem in Kap. 3.3.2 (Seite 37) beschriebenen aufgesättigten SVV folglich nicht der Zustand „ausgehärtet“ zugewiesen werden, obwohl die hergestellten Prüfkörper zwar nicht komplett hydratisiert, aber dennoch ausgehärtet sind.

In Abb. 5.3 ist die für die Mechanik wichtige Beziehung zwischen der bei der Aufsättigung eines SVV-Prüfkörpers mit einer Anfangsporosität von  $\eta_0 = 50 \%$  in die Prüfkörperform eingetragenen Lösungsmenge und dem entstehenden Festphasenvolumen dargestellt. Daraus ist deutlich zu erkennen, dass das Festphasenvolumen mit Zugabe von Lösung linear ansteigt. Bei etwa 420 g Lösung erreicht das Festphasenvolumen das Volumen des Prüfkörpers (Durchmesser = 70 mm, Höhe = 140 mm). Bei weiterer Lösungszugabe und damit Festphasenentwicklung würde sich ein Kristallisationsdruck einstellen. In den Laborversuchen wurden etwa 378 g Lösung gebunden.



**Abb. 5.2** Lösungsmengenabhängige Mineralphasen und ihre Massen beim homogenen Aufsättigungsprozess in einer Referenzzone



**Abb. 5.3** Entwicklung des Festphasenvolumens bei der homogenen Simulation des Aufsättigungsprozesses

#### 5.1.4 Simulation einer idealen inhomogenen Aufsättigung

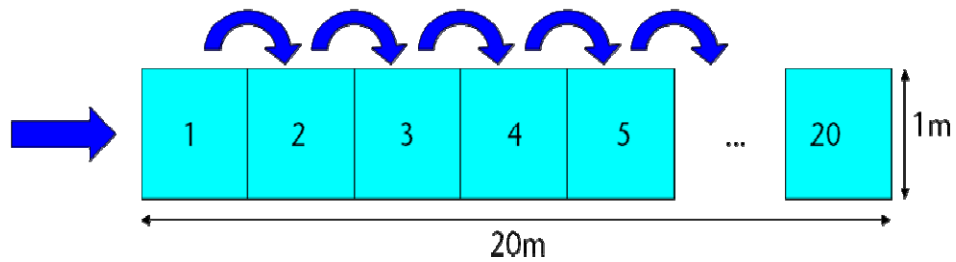
Die ersten Simulationen sind unter der Voraussetzung vorgenommen worden, dass die chemischen Prozesse während der Aufsättigung vernachlässigt werden können. In



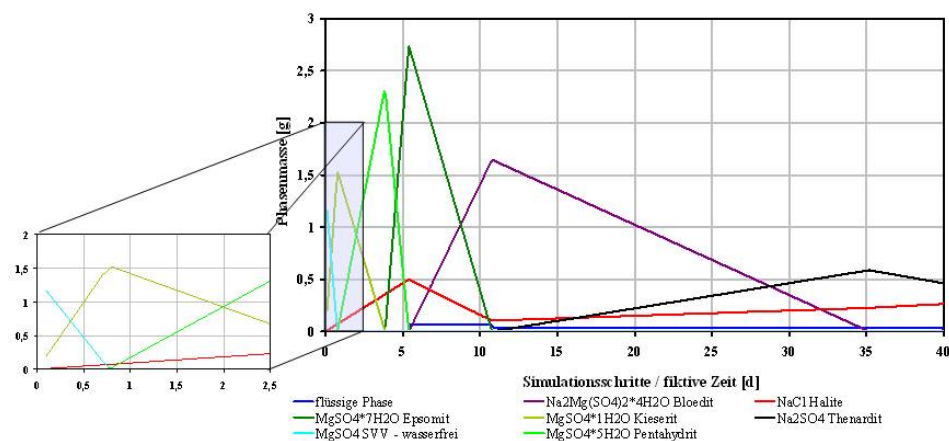
Anbetracht der Tatsache, dass der Aufsättigungsprozess in der Größenordnung von Stunden nahezu vollständig abgeschlossen ist, der Prüfkörper jedoch größenordnungsmäßig noch einen weiteren Monat zum Aushärten benötigt, erschien diese Annahme zunächst sinnvoll. Das in Kap. 5.1.3 präsentierte Resultat einer derartigen Simulation ist ein homogener Prüfkörper, der aus NaCl, Kieserit und Pentahydrat besteht. Die chemischen Analysen von der GRS haben jedoch gezeigt, dass tatsächlich deutlich mehr Mineralphasen auftreten und dass auch zwischen Einlass- und Auslassöffnung deutliche Mineralphasenbestandsunterschiede bestehen. Dazu kommt, dass bei der Aufsättigung sehr rasch eine intensive Wärmeentwicklung einsetzt, die auf eine große chemische Aktivität bereits in den ersten Minuten schließen lässt. Um diesen Reaktionsverlauf auch in der Simulation anzunähern, sind Berechnungen unter erweiterten Annahmen durchgeführt worden.

Ausgangspunkt für diese (ebenfalls nur chemische) Simulation war die Annahme, dass der Prüfkörper in einzelne Zonen segmentiert wird, dass die chemischen Reaktionen in den einzelnen Zonen dem Aufsättigungsprozess abstrahiert folgend sukzessive instantan erfolgen und erst nach der Reaktion die Lösung von einer Zone zur nächsten Zone weiter transportiert wird. Der Aufsättigungsprozess selbst als hydraulischer Prozess wird nicht simuliert. Der Simulation wurde ein einem Bohrlochverschluss sehr grob angenäherter mit SVV verfüllter Hohlraum mit einem quadratischen Querschnitt von  $A = 1 \text{ m}^2$  und einer Länge von  $L = 20 \text{ m}$  zugrunde gelegt. Die Segmentierung erfolgte mit 20 Zonen (Abb. 5.4). Für jede Zone wurde den Laborversuchen entsprechend eine Ausgangsmasse von  $1333 \text{ kg MgSO}_4$  vorgegeben. Zur Simulation des Aufsättigungsprozesses wird die gesamte Lösung für die 20 Zonen (ca.  $14 \cdot 10^3 \text{ kg}$ ) schrittweise zu jeweils gleichen Teilen über 40 (fiktive) Tage in Zone eins eingegeben und das jeweilige chemische Gleichgewicht der Mineralphasen berechnet. Die jeweils nicht verbrauchte Lösungsmenge der  $n$ -ten Zone wird schrittweise an die  $(n+1)$ -te Zone weitergegeben.

In Abb. 5.5 ist die mit diesem Simulationsansatz berechnete Entwicklung der Mineralphasenmassen in der ersten Zone dargestellt. In dieser Zone stimmen die berechneten Mineralphasen zunächst mit denen der homogenen Simulationmethode überein, doch sobald die in die erste Zone zugegebene Lösungsmenge derjenigen im Labor entspricht, sind starke Unterschiede zu verzeichnen, da in der ersten Zone im Rahmen der Aufsättigungssimulation insgesamt die 20-fache Menge Lösung eingegeben wird. Zunächst bildet sich Epsomit, bis die maximal mögliche Menge an Wasser gebunden ist.



**Abb. 5.4** Schematische Darstellung des Simulationsmodells

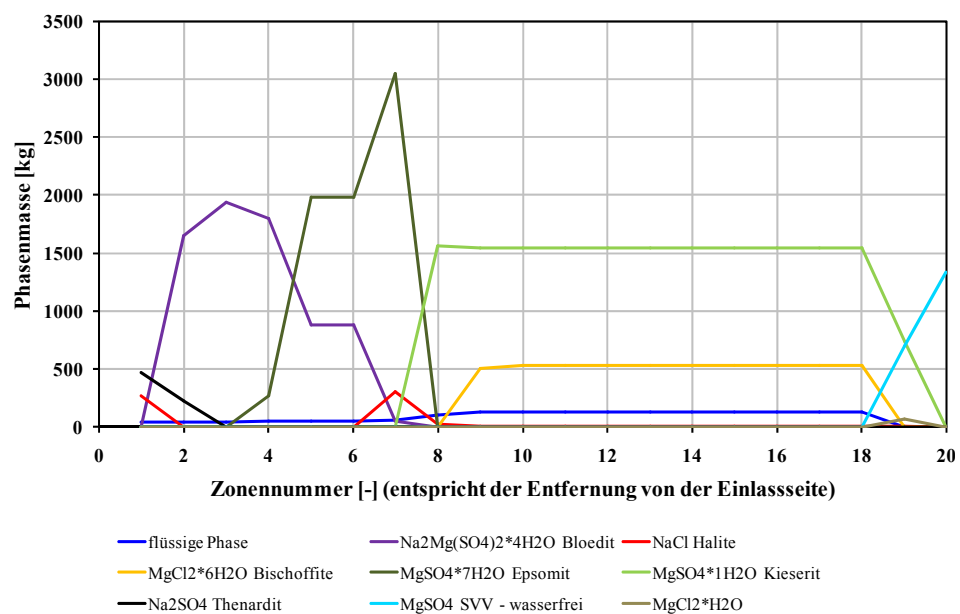


**Abb. 5.5** Entwicklung der Mineralphasenmassen in der ersten der 20 Zonen über eine Aufsättigungszeit von 40 (fiktiven) Tagen (in den ersten Schritten ist die Entwicklung identisch wie bei der Simulation einer homogenen Aufsättigung)

Nachdem die erste Zone komplett aus Epsomit und NaCl besteht, kann keine weitere Lösung gebunden werden, und es tritt eine flüssige Phase auf. In dieser flüssigen Phase lösen sich die einzelnen Ionen bzw. Mineralphasen entsprechend ihrer Ionenstärke mit entsprechendem Volumen- bzw. Massenabtransport. Die Bildung von Blödit ( $\text{Na}_2\text{Mg}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ) und Thenardit ( $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ) bei gleichzeitiger Abnahme des ausgefallenen Halits macht deutlich, dass mit der weitertransportierten Lösung auch Ionen aus Zone eins in Zone zwei transportiert werden. Somit wird das Natrium aus dem Halit im Blödit gebunden bzw. später im Thenardit, während das Chlor in keiner festen Phasen gebunden wird, also in gelöster Form vorliegt und abtransportiert wird. Ab Tag 35 wird Thenardit abtransportiert und die Zusammensetzung der Lösung ändert sich folglich, da sie jetzt das zuvor im Thenardit gebundene Natrium enthält. Somit ist die Lösung, die an die zweite Zone weitergegeben wird, keine reine NaCl-Lösung mehr und sie verändert sich sogar zeitlich. Das Elementinventar verändert sich ebenfalls und die

Phasenentwicklung in der zweiten Zone verläuft aufgrund der in der chemischen Zusammensetzung veränderten Salzlösung nicht mehr identisch zu der Phasenentwicklung in der ersten Zone. Generalisierend folgt daraus, dass sich demnach von Zone zu Zone die Lösung verändert, wodurch jede Zone mit einer anderen Lösung aufgesättigt wird und sich somit in jeder Zone ein unterschiedliches Elementinventar und damit ein unterschiedlicher Mineralphasenbestand entwickeln.

Das Resultat ist ein mineralogisch stark inhomogen aufgebauter Prüfkörper. Abb. 5.6 zeigt die Endphasenbestände in den einzelnen Zonen 1 bis 20. Diese Endphasenbestände entsprechen der simulierten Phasenverteilung, die sich zwischen Einlass- und Auslassseite über den Prüfkörper verteilt ergibt.



**Abb. 5.6** Endphasenbestand in den einzelnen Zonen

An der Einlassseite ist überwiegend Blödit vorhanden, danach kommen mehrere Zonen mit vorwiegend Epsomit, gefolgt von mehreren Zonen mit hohem Kieseritanteil und einem Anteil von Bischoffit ( $\text{MgCl}_2 \cdot 6(\text{H}_2\text{O})$ ). Dass heißt, dass mit der Lösung weitertransportierte Chlor aus den ersten Zonen lagert sich in den weiter hinten liegenden Zonen in Form von Bischoffit ab. In den letzten beiden Zonen findet sich schließlich noch wasserfreies  $\text{MgSO}_4$ , das heißt, dass nach der chemischen Simulation die Lösungsmenge, die im Labor bei der künstlichen Aufsättigung in toto verpresst wird, nicht ausreicht, um die 20 Zonen komplett aufzusättigen. Vielmehr dringt die Lösung nur bis zu Zone 19 vor.

Dieses Ergebnis eignet sich auch sehr gut zu einem Vergleich mit der von der GRS bestimmten mineralogischen Zusammensetzung. Die Ermittlung der mineralogischen Zusammensetzung des SVV-Materials wurde jeweils an der Ober- und Unterseite der Prüfkörper vorgenommen und untersucht, ob die messtechnisch ermittelten Mineralphasen auch rechnerisch vorhanden sind oder nicht. Tab. 5.1 zeigt einen qualitativen Vergleich der ermittelten Phasenbestände an der Einlass- und der Auslassseite eines Prüfkörpers aus den Mineralanalysen von der GRS und aus der rechnerischen Simulation bei einer inhomogenen Aufsättigung.

**Tab. 5.1** Qualitativer Vergleich der ermittelten Phasenbestände an Einlass- und Auslassseite der Prüfkörper aus der Mineralanalyse von der GRS und aus der Simulation einer inhomogenen Aufsättigung

| Phase                        | Messdaten<br>Einlass | Simulation<br>Einlass | Messdaten<br>Auslass | Simulation<br>Auslass |
|------------------------------|----------------------|-----------------------|----------------------|-----------------------|
| Starkeyit                    | ja                   | nein                  | ja                   | nein                  |
| Blödit                       | ja                   | ja                    | nein                 | nein                  |
| Halit                        | ja                   | (nein)                | ja                   | ja                    |
| MgSO <sub>4</sub> wasserfrei | ja                   | nein                  | (ja)                 | ja                    |
| Pentahydrat                  | ja                   | nein                  | nein                 | nein                  |
| Hexahydrat                   | nein                 | nein                  | nein                 | nein                  |
| Epsomit                      | nein                 | nein                  | nein                 | nein                  |

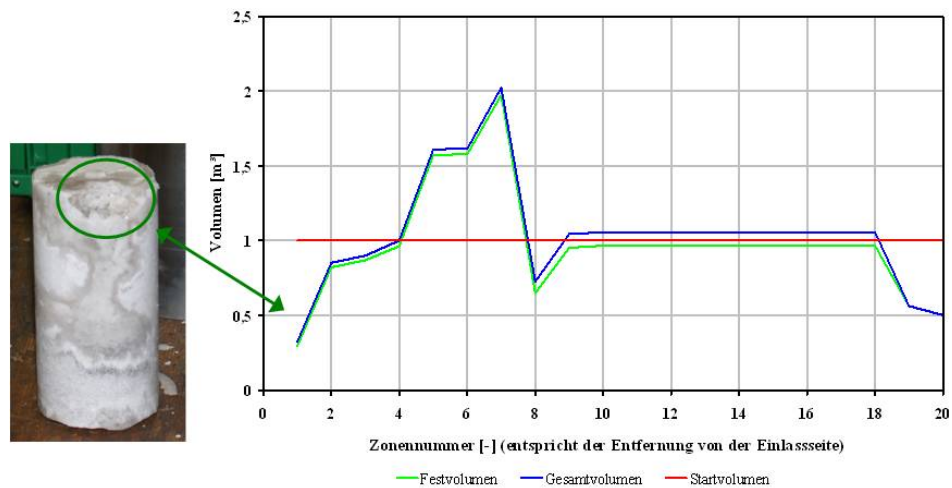
Keine Übereinstimmung zeigt sich beim Starkeyit, was nach Moog (GRS) daran liegt, dass sich diese Mineralphase aus energetischen Gründen theoretisch nicht bilden dürfte, in der Realität aber infolge einer nicht idealen Durchmischung dennoch auftritt. Durch die Verwendung von gesättigter NaCl-Lösung können bereits kleine Änderungen z. B. der Temperatur, des Drucks oder der Lösungszusammensetzung zum Ausfall von Halit führen. Somit ist das Auftreten von Halit an allen Stellen, die die Lösung erreicht, wahrscheinlich, während es in den Berechnungen durch die Idealisierung zu keinen Ausfällungen kommt. MgSO<sub>4</sub> als Ausgangsmaterial ist bereits zu Beginn im ganzen Prüfkörper verteilt. Während der Aufsättigung reagiert es jedoch nicht vollständig, da es selbst den vollständigen gleichmäßigen Zutritt von Lösung verhindert, z. B. durch Bildung von Klumpen mit eingeschlossenem, wasserfreiem MgSO<sub>4</sub>. Somit wird MgSO<sub>4</sub> gemessen, tritt jedoch nicht in der die chemischen Prozesse idealisiert beschreibenden Simulation auf. Als Fazit des Phasenvergleiches lässt sich insgesamt allerdings fest-

halten, dass trotz der starken Idealisierung die Ergebnisse der Simulation die Realität qualitativ gesehen wiedergeben.

Für die chemisch-mechanische Kopplung ist vor allem die berechnete und in Abb. 6.7 dargestellte Ausbildung der Endvolumina der 20 Zonen, d. h. das Volumen der festen Phasen und das Gesamtvolumen (flüssige und feste Phasen), von Bedeutung. Hier zeigt sich am Ende der Simulation eine sehr inhomogene Volumenverteilung. Die Zonen 9 bis 18 haben ihr Volumen nicht vergrößert, sondern lediglich die verbleibende Porosität auf den einstelligen Prozentbereich verkleinert, während die Zonen 5 bis 7 ihr Volumen um 60 bis fast 100 % vergrößert haben. Die Zonen 2, 3 und 18 haben sich nur wenig vergrößert, Zone 20 hat ihr Volumen konstant gehalten und die erste Zone hat durch Auflösung und Abtransport von Elementen ihr Volumen sogar verkleinert. Das aufsummierte Volumen der einzelnen Zonen beträgt etwa 101 % des Startvolumens, womit sich das Volumen insgesamt um etwa 1 % vergrößert.

Somit kann sich bei der inhomogenen Simulation ein Kristallisationsdruck aufbauen, während bei der homogenen Simulation bei derselben Menge Lösung immer noch eine Restporosität von etwa 3 % vorhanden ist, so dass sich das Volumen insgesamt nicht vergrößert. Allerdings zeigt sich auch, dass die Volumenausdehnung lokal sehr unterschiedlich ist, was die beobachteten starken Schwankungen des Kristallisationsdrucks bei verschiedenen Prüfkörpern erklären könnte. Mit den Endvolumina nach Abb. 5.7 lässt sich außerdem auch der aufgelöste Bereich an der Einlassöffnung erklären, denn das Volumen der ersten Zone verringert sich durch die Auflösung von festen Phasen und anschließenden Abtransport mit der flüssigen Phase in die nächste Zone deutlich unter das Ausgangsvolumen.

Somit liefert die inhomogene Simulation des Aufsättigungsprozesses sowohl plausible Resultate für die Mineralphasenverteilung wie auch für die inhomogene Volumenvergrößerung. Aus diesem Grund wird im Folgenden davon ausgegangen, dass der Simulationsansatz einer schrittweisen zonal begrenzten Aufsättigung mit jeweils instantaner chemischer Reaktion eher der Realität entspricht als der einer instantanen Aufsättigung.



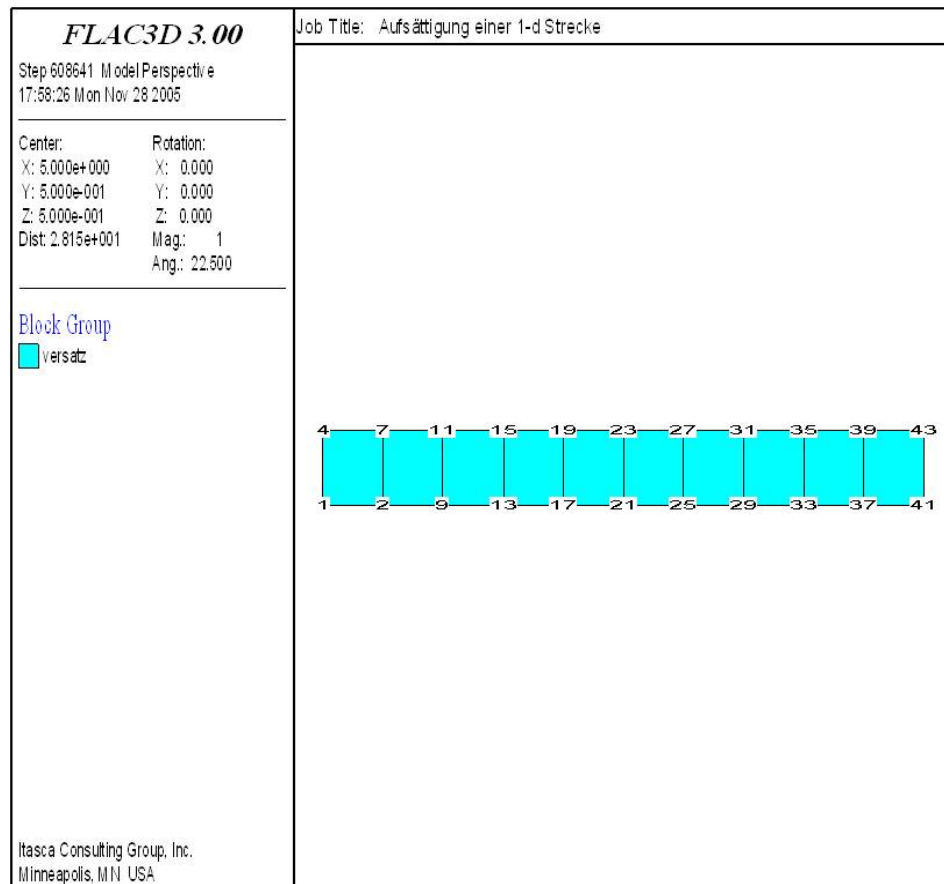
**Abb. 5.7** Endvolumina der 20 Zonen

### 5.1.5 Chemisch-mechanisch gekoppelte Simulation mit der Software MISES3

Der Vergleich zwischen der Simulation einer homogenen und einer inhomogenen Aufsättigung hat gezeigt, dass die Berechnungen mit der homogenen instantanen Aufsättigung die Realität nur unzureichend wiedergeben, während bei der Simulation mit einer schrittweise zonal und nur in den einzelnen Zonen jeweils instantan angenommenen Aufsättigung die Realität zumindest teilweise zutreffend abgebildet wird. Belegt wird diese Aussage auch durch die experimentellen Ergebnisse der GRS, die zeigen, dass Aufsättigung und Aushärtung im Prüfkörper keine homogenen Prozesse sind.

Damit wird ersichtlich, dass der erste Schritt hin zur Kopplung der chemischen mit den mechanischen Prozessen die Kopplung der chemischen mit den hydraulischen Prozessen ist, um das Vordringen der Lösung durch den SVV-Prüfkörper, d. h. den Aufsättigungsprozess in Realzeit simulieren zu können. Dabei wäre das SVV-Material als poröses Material anzusehen, charakterisiert durch einen veränderlichen Porenanteil und eine veränderliche Permeabilität. In der Software MISES3 ist jedoch für ein poröses Material mit Wasserströmung weder die Berechnung eines Massentransports in der fluiden Phase noch die eines Aufsättigungsprozesses möglich. Eine Neuimplementierung derartiger Prozesse erfordert tief greifende Eingriffe in die Programmsoftware, so dass die Kopplung des chemischen Simulators mit MISES3 im Rahmen dieses Projektes nicht durchführbar ist.

Alternativ wird daher der Umstieg auf die seit Jahren bewährte Software FLAC3D von der Firma Itasca erwogen, da mit ihr auch Aufsättigungsprozesse simuliert werden können. Als Testmodell wurde ein mit SVV versetztes Bohrloch von 10 m Länge und einem Querschnitt von  $A = 1 \text{ m}^2$  mit einer Permeabilität von  $K = 10^{-10} \text{ m}^2$  aufgesättigt. Abb. 5.8 zeigt das Simulationsmodell.



**Abb. 5.8** Modell zur Simulation der Aufsättigung eines 10 m langen Bohrlochs mit FLAC3D

Der Aufsättigungsprozess erfolgt von links nach rechts. In Abb. 5.9 sind die Zeiten dargestellt, die benötigt werden, bis die einzelnen Zonen gesättigt sind. Die Sättigung an den einzelnen Knotenpunkten berechnet sich in FLAC3D als Mittelwert der Sättigung der Zonen. Das heißt, wenn sich die Sättigungsfront genau zwischen zwei Zonen befindet, ist die Sättigung des Knotenpunktes  $S = 0,5$ , da der Mittelwert aus einer voll gesättigten Zone mit  $S = 1$  und einer nicht gesättigten Zone mit  $S = 0$  gebildet wird. Dieser Fehler wurde in Abb. 5.9 dadurch korrigiert, dass die berechneten Aufsättigungszeiten um die halbe Zonendicke verschoben wurden. Die aus der numerischen

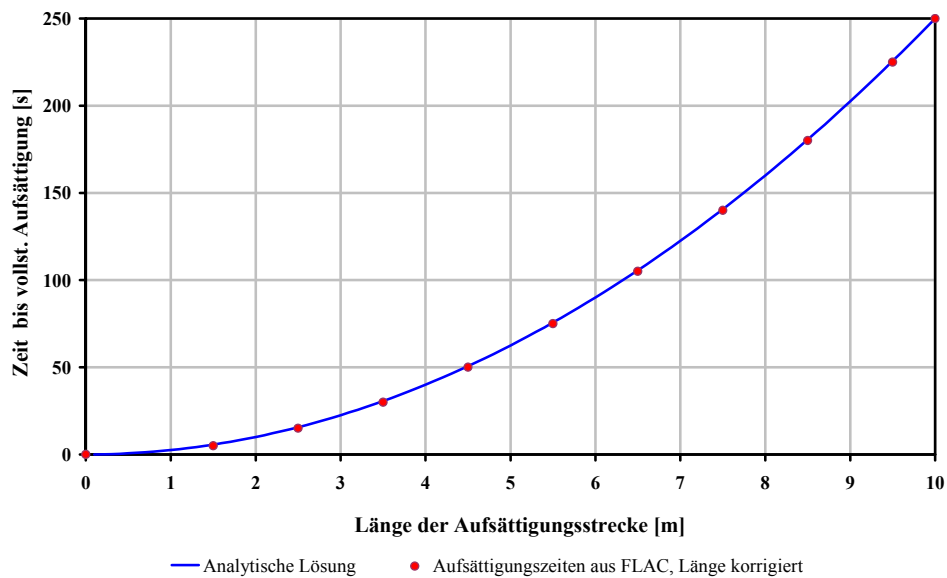
Simulation erhaltenen Aufsättigungszeiten werden mit den Aufsättigungszeiten einer analytischen Berechnung verglichen, die aus der Beziehung

$$t = \frac{(1-S) \cdot n \cdot l^2}{2 \cdot k_f \cdot p} \quad (5.1)$$

folgt mit

$$k_f = \frac{K \cdot \gamma}{\eta} \quad (5.2)$$

und  $S$  = Anfangssättigung [1],  $n$  = Porosität [1],  $l$  = Länge Aufsättigungsstrecke [m],  $k_f$  = Durchfluss [m/s],  $p$  = Druck [0,1 MPa] bzw. [mWs],  $K$  = Permeabilität [ $m_2$ ],  $\gamma$  = Wichte [ $MN/m^3$ ] und  $\eta$  = dynamische Viskosität [ $MPa \cdot s$ ].



**Abb. 5.9** Vergleich der Aufsättigungszeiten bei numerischer Simulation mit einer analytischen Lösung

Die Berechnungsergebnisse der numerischen Simulationen weisen eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung auf und zeigen damit, dass FLAC3D für die Berechnung von Aufsättigungsprozessen geeignet ist. Die Eignung im Bezug auf die Simulation mechanischer Prozesse hat FLAC3D bereits umfangreich unter Beweis gestellt, [ITA 05] und [ITA 08]. Somit bietet FLAC3D im Gegensatz zu MISES3 zumindest die notwendigen Voraussetzungen für eine einfache C:HM-Kopplung. Zusätzlich



verfügt FLAC3D über eine modernere Programmierung, so dass die Berechnungen weniger Rechenzeit erfordern, die Diskretisierung mehr Zonen umfassen kann, die schnellere Durchführung von Berechnungen durch die komfortablere Bedienung der objektorientierten Programmiersprache C++ möglich ist und dadurch auch dreidimensionale Simulationen in vertretbarer Rechenzeit möglich werden könnten.

#### **5.1.6 Fehlerdiagnose**

Bestärkt wird der Wechsel von MISES3 nach FLAC3D auch dadurch, dass in FLAC3D durch die Programmierung in C++ die objektorientierte Version von ChemApp benutzt werden kann mit der Hoffnung, ein stabileres Programm zur Verfügung zu haben. Denn die Fortranversion von ChemApp (V 5.3.9) war selbst bei sehr einfachen Modellen, wie z. B. dem Modell in Abb. 5.8, nur in sehr wenigen Fällen in der Lage, alle Phasenverläufe der Zonen ohne Fehler zu berechnen. Üblicherweise ist ChemApp bei solchen Fehlern nicht in der Lage, ein chemisches Gleichgewicht zu bestimmen, was bei Elementinventaren, die zu rechnerischen Extrema führen, nachvollziehbar ist. In diesen Fällen gibt ChemApp das unveränderte Element- und Phaseninventar zurück. Manchmal wird jedoch nicht das vollständige Inventar zurückgegeben und Masse verschwindet. Die Suche nach diesem Fehler, möglichen Ursachen und vor allem die Erbringung eines Nachweises, dass der Fehler in ChemApp und nicht in MISES3 bzw. EQLink liegt, waren in diesem Fall extrem zeitaufwändig. Die Ursache hierfür liegt zum einen daran, dass der gekoppelte Code von MISES3, EQLink und ChemApp auf den Fehler untersucht werden muss, und zum anderen daran, dass der Quellcode von MISES3 nicht vollständig und der von ChemApp gar nicht zugänglich ist und somit der Fehler nicht direkt aufgespürt werden kann. Von der Entdeckung des Fehlers im Januar 2006 bis zur Übergabe der verbesserten Version 5.4.4 vergingen über 6 Monate.

#### **5.2 Überlegungen zur Definition eines Hydratisierungs- bzw. Aushärtungsgrades**

Die Entwicklung eines Stoffmodells für SVV ist im Projektantrag eng mit dem Hydratisierungsgrad verknüpft worden. Der Hydratisierungsgrad beschreibt das zeitabhängige Voranschreiten einer chemischen Reaktion in Abhängigkeit von der Menge gebundenen Wassers bzw. Lösung. Für das Material Spritzbeton kann so ein derartiger Modellansatz erfolgreich verwendet werden, da Spritzbeton mit einer bestimmten Menge Wasser angerührt wird und dadurch die maximale Wassermenge, die je Volumenein-

heit im Lauf der Zeit gebunden werden kann, definiert ist. Im Fall des SVV kann jedoch auch ein bei einer vorgegebenen Wassermenge schon als ausgehärtet betrachtetes Material noch weiteres Wasser binden, das heißt, dass das Material auch nach einem zunächst als ausgehärtet angesehenen Zustand, dem dann der Hydratisierungsgrad 1 zugewiesen würde, bei weiterer Lösungszuführung immer noch die Möglichkeit hat, weiteres Wasser zu binden und somit der Hydratisierungsgrad bei weiterer Lösungszuführung größer als der Wert 1 und damit nicht mehr definiert wäre. Ein weiterer Unterschied zu Spritzbeton ist darin zu sehen, dass bei der inhomogenen Aufsättigung jede einzelne Zone eine andere Entwicklung des Phasenbestands, der gebundenen Wasser- bzw. Lösungsmenge und des Volumens durchläuft und am Ende des Aufsättigungsprozesses jede Zone eine individuelle Lösungsmenge bzw. Wassermenge gebunden hat. Der Hydratisierungsgrad hängt damit nicht mehr nur von der Zeit ab, sondern auch vom Ort, wobei die zeitliche Entwicklung ebenfalls ortsabhängig ist. Die Bestimmung eines mittleren Hydratisierungsgrades ist auf Grundlage eines punktuell gemessenen Kristallisationsdruckes  $P_k(t)$  nicht möglich. Somit kann ein einheitlicher (mittlerer) Hydratisierungsgrad für alle Zonen bei der Simulation eines inhomogenen Aushärtungsprozesses nicht angegeben werden.

Unabhängig von dem verwendeten Simulationsprogramm müssen die relevanten hydraulischen und mechanischen Änderungen in den Materialeigenschaften, die durch die jeweils ablaufenden chemischen Prozesse bedingt sind, in den mechanisch-hydraulischen Programmteil übergeben werden. In einem ersten Ansatz soll versucht werden, eine neue Definition des Hydratisierungsgrades zu finden bzw. eine Funktion zu formulieren, die den Fortschritt der chemischen Reaktion beschreibt. Als Grundlage dafür kommen der Zeitparameter und als weitere Parameter die Ausgabevariablen Phasenbestand, Volumen und Kristallisationsdruck des Chemie-Simulators in Frage. Die mit diesen Parametern bestehenden Möglichkeiten zur Kopplung der chemischen mit den hydraulisch-mechanischen Prozessen werden im Folgenden einzeln durchgegangen und beurteilt:

- Eine zeitabhängige Aushärtungsfunktion, in der einfachsten Form als „x Sekunden nach Lösungseintritt ist die Zone ausgehärtet“ definiert, macht wenig Sinn, da die Aushärtungszeiten der einzelnen Zonen je nach chemischen Reaktionen unterschiedlich sind. Z. B. beginnt der Aushärtungsprozess an der Einlassseite mit der Flutung, während an der Auslassseite die Aushärtung erst beginnt, wenn das  $MgSO_4$  nahezu vollständig aufgesättigt ist. Ferner ist diese Definition unabhängig von den chemischen Prozessen und damit die gesamte Modellierung ebenfalls rein mechanisch-hydraulisch.

- Der Phasenbestand ist zu komplex, um ihn in eine Aushärtungsfunktion zu überführen; hier müssten die Phasen Kieserit, Natriumchlorid, Pentahydrat, Epsomit, Blödit, Bischoffit und Thenardit betrachtet werden, wobei sich diese Phasen in allen Zonen unterschiedlich entwickeln und am Ende in allen Zonen in unterschiedlichen Mengen vorkommen. Es müssten also zur Vereinfachung einzelne Phasen als Indikatoren ausgewählt werden.

Die unreaktierte Menge an  $\text{MgSO}_4$  kann nicht als Indikator verwendet werden, da bei idealer Durchmischung bereits ein mol Wasser pro mol wasserfreiem  $\text{MgSO}_4$  ausreicht, um sämtliche  $\text{MgSO}_4$ -Moleküle in Kieserit umwandeln zu können. Das ausreagierte Volumen beträgt hier jedoch erst ca. 63 % des Zonenvolumens und die Reaktion geht in manchen Zonen noch weiter bis maximal 183 %, Tab. 3.2 (Seite 33). Somit würde hier manchen Zonen rechnerisch bei viel zu kleiner Menge an gebundener Lösung ein ausgehärteter Zustand zugewiesen als dieses in der Realität der Fall ist.

Bei der aufgenommenen Lösungsmasse pro Zone als Indikator muss eine Bilanz verwendet werden, da Lösung durch die Zonen fließt. Bei der Aufstellung einer Bilanz würden in dem Modell der inhomogenen Aufsättigung jedoch negative Werte vorkommen, da aus den Zonen nahe dem Lösungseintritt feste Mineralphasen in Lösung gehen und abtransportiert werden. Außerdem würden die gelösten Festphasen als Lösungsmasse interpretiert werden und somit fälschlicherweise die Menge an aufgenommener Lösungsmasse erhöhen.

Analog gilt obige Begründung auch für die Gesamtmasse bzw. Festphasenmasse der einzelnen Zonen bei ihrer Beurteilung als geeigneter Indikator.

Andere Phasen wie Kieserit,  $\text{NaCl}$ , Pentahydrat, Epsomit, Blödit und Thenardit allein sind als Indikator nicht geeignet, da sie nur in bestimmten Zonen eines Modells auftreten und demnach nicht repräsentativ sind als Indikator für alle Zonen.

Der Phasenverlauf einer ausgewählten Zone, z. B. der ersten Zone, ist aufgrund der verschiedenen Phasen, die sich im Laufe der Aushärtung bilden, schwer in ein Modell umzusetzen. Ungeeignet ist der Phasenverlauf deshalb, weil jede Zone ihren eigenen Phasenverlauf durchläuft, der sich zudem deutlich von dem anderer Zonen unterscheiden kann, so dass keine Zone repräsentativ für alle Zonen ist.

- Das Festphasenvolumen erscheint zunächst als geeigneter Indikator, da hiermit ein integraler Parameter vorliegt, der alle mineralischen Festphasen berücksichtigt.

Doch auch hier unterscheiden sich die Volumenentwicklungen der einzelnen Zonen und vor allem unterscheiden sich auch die Endvolumina der einzelnen Zonen deutlich, wie in Abb. 5.7 gezeigt wird. Der ausgehärtete Prüfkörper besteht demnach aus Zonen mit einem Festmassenvolumen von 30 % bis 180 % bezogen auf das Volumen der Ausgangsfestmasse, wodurch eine eindeutige Definition, bei welchem Festmassenvolumen eine Zone ausgehärtet ist, unabhängig vom Phasenbestand nicht möglich ist.

- Der Kristallisationsdruck als Indikator scheitert daran, dass Simulationen, bei denen der Kristallisationsdruck statt des Volumens berechnet wird, nicht durchgeführt wurden. ChemApp benötigt hierfür eine Gasphase, sodass dann bei Aufsättigung Mehrphasenströme berechnet werden müssten. Grundsätzlich besteht das gleiche Problem wie bei der Wahl des Festphasenvolumens als Indikator.

Abschließend kann demnach festgestellt werden, dass für den SVV aufgrund der zu erwartenden starken Inhomogenitäten im Material die Grundlage für die Definition eines Aushärtungsgrades als integraler Indikator für den Materialzustand fehlt. Somit muss ein anderer Weg gefunden werden, um die Kopplung chemischer und hydraulisch-mechanischer Prozesse mit FLAC3D zu realisieren.

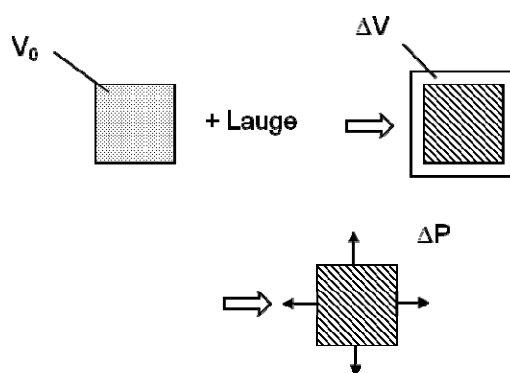
### **5.3 Vorüberlegungen zu den Möglichkeiten einer C:HM-Kopplung mit FLAC3D**

#### **5.3.1 Mechanischer Ansatz**

Da der ursprünglich angedachte vereinfachte Ansatz einer C:HM-Kopplung über den Kopplungsparameter Hydratisierungsgrad entsprechend Kap. 5.1.5 nicht umsetzbar erscheint, wird für das weitere Vorgehen zunächst ein Blick auf die Möglichkeiten der C:HM-Kopplung mit dem Code FLAC3D geworfen. In einem ersten Bearbeitungsschritt soll versucht werden, einen Überblick über die verschiedenen C:HM-Effekte, deren Parameter und ihre Umsetzung in die Numerik zu erhalten. Dazu wird dem ursprünglichen Ansatz der C:HM-Kopplung der Hydratisierungsgrad durch eine direkte Übergabe von chemischen Parametern in die Mechanik ersetzt. Die wichtigsten Schritte der gekoppelten Simulation mit den jeweilig übergebenen Parametern sind in Abb. 5.11 schematisch dargestellt. Sie werden im Folgenden kurz erläutert:

1. Verfüllen des Hohlraums (Bohrlochs) mit  $\text{MgSO}_4$ : Die C:HM-Simulation beginnt mit dem Verfüllen des Bohrlochbereichs des Verschlusses mit SVV und der Segmentierung dieses mit SVV verfüllten Bohrlochbereichs in  $n$  Zonen, die dann sukzessive in  $n$  Schritten aufgesättigt werden. Dabei wird in jedem (fiktiven) Zeitschritt die in Zone  $i$  vorhandene Lösungsmenge an Zone  $i+1$  weitergegeben. Zum Startzeitpunkt der Aufsättigung muss einmalig das chemische Start-Elementinventar definiert werden, d. h. also die Masse  $\text{MgSO}_4$  pro Zone festgelegt werden. Diese wird aus den Laborversuchen übernommen bzw. der Dichte berechnet und beträgt  $M = 1336 \text{ kg/m}^3$  Zonenvolumen. Da dieser Schritt nur einmalig auszuführen ist, wird er im Flussdiagramm außerhalb der durch sukzessive Aufsättigung bedingten Schleife, die in jedem einzelnen Zeitschritt wiederholt zu durchlaufen ist, angeordnet.
2. Aufsättigung: Die Aufsättigung erfolgt immer von Zone 1 ausgehend. In Zone 1 wird der im Zeitschritt 1 und in den  $n$  Folgezeitschritten jeweils 1-ntel des Gesamtlösungsmenge zugeführt. Mit Hilfe des Darcy-Strömungsmodells kann mit Ansatz der aktuellen zonalen Permeabilität ein hydraulischer Fluss bzw. ein Volumenstrom von einer Zone zur benachbarten berechnet werden. Das Fluid hat jeweilig die Zusammensetzung, die mit dem Chemiesimulator EQLink berechnet worden ist. Damit kann der Massentransport in jedem Zeitschritt von Zone zu Zone berechnet werden.
3. Aktualisierung des Elementinventars: Zum bereits vorhandenen Elementinventar jeder Zone werden die mit der Lösung transportierten Feststoffmassen der jeweiligen Zone, in Elementmassen zerlegt, dazu addiert ebenso wie die Wassermasse. Das so berechnete neue Elementinventar  $ig$  wird mit der aktuellen Wassermasse an EQLink weitergegeben.
4. Aktualisierung der Mineralphasen und Lösungszusammensetzung: EQLink berechnet zonenweise das thermodynamische Gleichgewicht für das aktuelle Elementinventar (Feststoff und Wasser) und daraus die Lösungszusammensetzung  $il$ , den Festphasenbestand  $ib$ , das Feststoffvolumen  $V_{\text{fest}}$  und das Flüssigkeitsvolumen  $V_{\text{flüssig}}$ . Die Berechnung des Kristallisationsdruckes ist in FLAC3D nicht möglich, da EQLink bzw. ChemApp hierfür eine Gasphase benötigt, die in FLAC3D mit dem Einphasenströmungsmodell nicht berücksichtigt werden kann. Könnte ein Mehrphasenfluss in FLAC3D berechnet werden, so könnte EQLink die entstehenden Kristallisationsdrücke und die Porositäten direkt berechnen ohne den Umweg über Schritt 4, in Abb. 5.11 grün dargestellt.

5. Chemisch bedingte Druckänderung: In EQLink werden die Volumenänderungen der jeweiligen Zone im jeweiligen (fiktiven) Zeitschritt berechnet. Diese Verformungen werden durch die umgebende Struktur (z. B. Zellenmantel, Gebirge) behindert, so dass im SVV Druckspannungen und in der umgebenden Struktur Zusatzspannungen entstehen. Die Druckspannungen im SVV entsprechen dem Kristallisationsdruck, der in der Kontaktfläche auf die umgebende Struktur wirkt. Dabei hängt der Kristallisationsdruck von der Steifigkeit des ausgehärteten SVV und der umgebenden Struktur ab. Zur rechnerischen Ermittlung der Druckspannungen im SVV und damit des Kristallisationsdruckes und ihrer bzw. seiner mechanischen Wirkung wird folgender Weg beschritten:
  - 5.1. Ermittlung der SVV-Dehnung in die einzelnen Koordinatenrichtungen (Annahme: in jede Richtung erfolgt eine gleiche Deformation)
  - 5.2. Ermitteln der erforderlichen Druckspannung  $\Delta p$ , die die Deformationen des SVV wieder rückgängig machen bei Ansatz des Verformungs- bzw. Kompressionsmodul des SVV (Abb. 5.10)
  - 5.3. Einprägung dieser Druckspannung in den SVV
  - 5.4. Ansatz der Druckspannung  $\Delta p$  als aktiv wirkende Randspannung in der Kontaktfläche SVV-umgebende Struktur und Berechnung der Spannungen und Deformationen im Verbundsystem SVV-umgebende Struktur
  - 5.5. Überlagerung der Spannungen und Deformation (Schritt 5.)

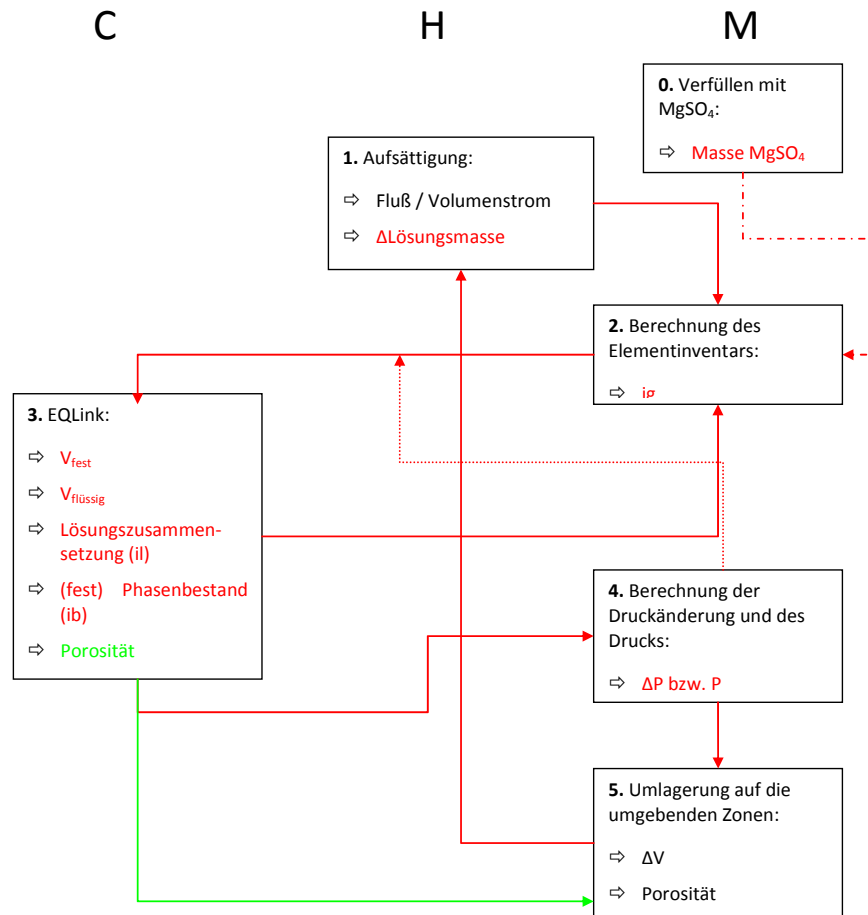


**Abb. 5.10** Skizze zur Veranschaulichung der Umrechnung von Volumenvergrößerung in Druckaufbau (Gleichung (5.3))

6. Geomechanische Berechnung mit Aktualisierung der mechanischen und hydraulischen Eigenschaften des SVV: Die aus dem chemischen Prozess resultierenden

Zusatzdrücke  $\Delta P$  werden in Form eines Kontaktdruckes an der Gebirgskontur angesetzt und im Verbundtragsystem Gebirge-SVV entsprechend den Steifigkeiten von Steinsalzgebirge und SVV auf das Tragsystem verteilt. Dabei werden neben den Zusatzspannungen in den Zonen auch die Verschiebungen der Knotenpunkte und die Verzerrungsänderungen in den Zonen berechnet. In Folge dessen erhält jede Zone einen aktualisierten Spannungszustand und weiter ein aktualisiertes Volumen, aus dem dann die aktuelle Porosität und dann über die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung eine aktualisierte Permeabilität berechnet werden kann. Die neu ermittelte Permeabilität wird zonal dem SVV für den nächsten Iterationsschritt zugeordnet. Nach dieser Aktualisierung beginnt mit Schritt 1 erneut die Aufsättigung in Zone 1 bzw. der Lösungstransport in den Zonen 2 – n.

Mit diesem prinzipiellen Procedere scheint eine C:HM-Kopplung programmtechnisch mit EQLink und FLAC3D möglich zu sein. Als offene Frage bleibt jedoch noch die Realisierung der Wechselwirkungen zwischen Chemie, Hydraulik und Mechanik.



**Abb. 5.11** Schematische Darstellung der geplanten Simulation des Aufsättigungsprozesses

Mit einem Stoffmodell und einer Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung können die Auswirkungen von Spannungsänderungen auf die Verformung der Zonen und von Porositätsänderungen auf die Permeabilität der Zonen berechnet werden. Fraglich sind noch die Realisierung der rechnerischen Ermittlung der Porositätsänderungen durch den Chemiesimulator und die Ableitung des sich dabei aufbauenden Kristallisationsdrucks. Zur Berechnung des Kristallisationsdruckes besteht die Möglichkeit, ihn über den Kompressionsmodul aus der Volumenänderung zu berechnen. Der Kompressionsmodul kann zeit- und druckbezogen aus den Festigkeitsversuchen abgeleitet werden. Der zeitliche Verlauf des Kristallisationsdruckes kann aus den gemessenen Kristallisationsdrücken entnommen werden. Die Berechnung des Kristallisationsdruckes erfolgt nach C. W. Correns und W. Steinborn [COR 39] (siehe Abb. 5.10):

$$\Delta P = \frac{V_0 - V}{V_0} \cdot \frac{1}{\beta_t} \text{ bzw. } P = \frac{V_0 - V}{V_0} \cdot \frac{1}{\beta_t} + P_0 \quad (5.3)$$



mit  $P_1$  = aktueller Druck,  $P_0$  = Anfangsdruck,  $V$  = Volumen,  $V_0$  = Anfangsvolumen,  $\beta$  = temperaturabhängiger Kompressibilitätskoeffizient bzw.  $1/\beta_1 = K$  (Kompressionsmodul).

Der Kompressionsmodul kann zum einen bei Kompressionsversuchen aus der negativen Druckänderung und der zugehörigen Volumenänderung bzw. dem Kehrwert des Kompressibilitätskoeffizienten berechnet werden:

$$K = -\frac{dP}{dV/V} \Rightarrow K = \frac{1}{\beta_t} \quad (5.4)$$

mit  $K$  = Kompressionsmodul,  $P$  = Druck und  $V$  = Volumen.

Zum anderen besteht die Möglichkeit zur Ableitung des Kompressionsmoduls aus Triaxialversuchen. Dann folgt:

$$K = \frac{E_\nu}{3(1-2\nu)} \quad (5.5)$$

mit  $E_\nu$  = Elastizitäts- bzw. Verformungsmodul und  $\nu$  = Poissonzahl.

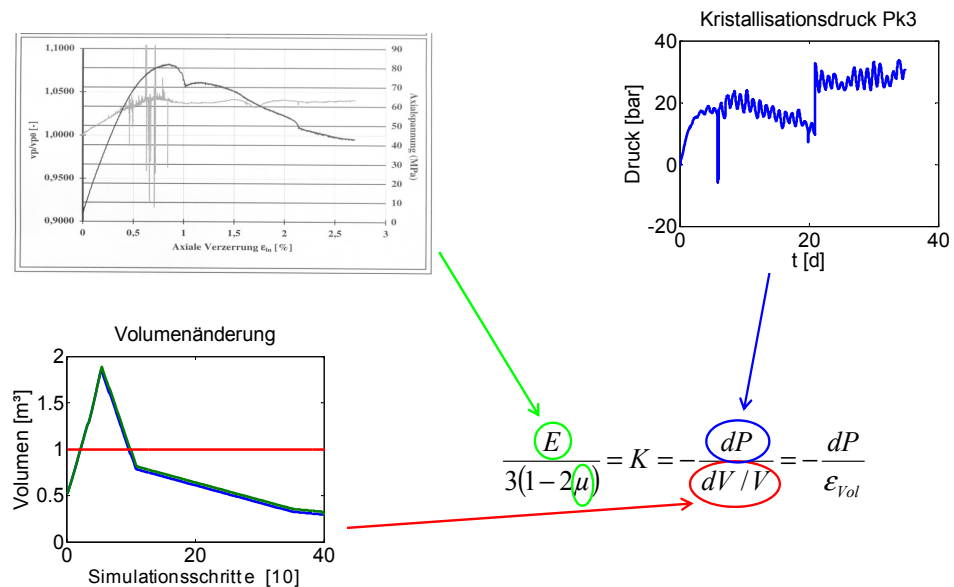
Zusammengeführt werden die verschiedenen mechanischen Größen und folgende Beziehung:

$$\frac{E}{3(1-2\nu)} = K = -\frac{dP}{dV/V} \quad (5.6)$$

mit  $E$ ,  $V$  = Elastizitäts- bzw. Verformungsmodul [Pa],  $\nu$  = Poissonzahl [1],  $K$  = Kompressionsmodul [Pa],  $P$  = Druck [Pa] und  $V$  = Volumen [m<sup>3</sup>].

Aus z. B. triaxialen Kompressionsversuchen können der Elastizitäts- bzw. Verformungsmodul  $E_\nu$  und die Poissonzahl  $\nu$  im ausgehärteten Zustand des SVV gemessen und damit der Kompressionsmodul  $K$  bestimmt werden (Abb. 5.12). Um den zeitlichen Verlauf des Kompressionsmoduls  $K$  während der Aushärtung ableiten zu können, werden die gemessenen Kristallisationsdrücke aus der Prüfkörperherstellung mit den mit EQLink durch die zeitabhängige Zugabe von Lösung simulierten Volumina verknüpft. Somit sollten Rückschlüsse auf die zeitliche Entwicklung des Kompressionsmoduls

und daraus auf Elastizitätsmodul und Poissonzahl möglich sein. Über Gleichung (5.6) können die berechneten Ergebnisse verifiziert werden.



**Abb. 5.12** Mögliche Zusammenführung von Messdaten aus Festigkeitsversuchen und der Prüfkörperherstellung mit den simulierten Volumina, um den Kristallisationsdruck zu berechnen und an den Laborversuchen zu validieren

Die Porosität kann für den Fall, dass sich kein Druck aufbaut, aus der Differenz zwischen dem Gesamtvolumen und dem Feststoffvolumen berechnet werden. Sobald bei der Untersuchung an Prüfkörpern das Feststoffvolumen zahlenmäßig in die Nähe des Gesamtvolumens der Prüfkörperzelle kommt, kann sich das Feststoffvolumen in der Zelle nicht mehr ungehindert vergrößern und es baut sich ein Druck im SVV auf, der auf die Zellwandungen wirkt. Aus den gemessenen Kristallisationsdrücken ist der Zeitpunkt bekannt, ab dem sich ein Druck aufbaut, und über die chemischen Berechnungen sind das zugehörige Volumen und damit die Porosität bekannt. Aus der Porosität, bei der der Kristallisationsdruckaufbau beginnt, und den gemessenen Porositätsänderungen der Kompressionsversuche sollte es möglich sein, einen Zusammenhang zwischen Porosität und Kristallisationsdruck abzuschätzen.

### 5.3.2 Beurteilung der C:HM-Kopplung mit FLAC3D

Die im vorhergehenden Kapitel vorgeschlagene Kopplung des Chemie-Simulators mit FLAC3D ist vom Prinzip her durchführbar, doch ist das Zusammenspiel zwischen Chemie, Hydraulik und Mechanik relativ komplex. Diese Komplexität liegt zum einen darin begründet, dass das rechnerisch ermittelte Zonenvolumen nicht direkt an FLAC3D übergeben werden kann, sondern in einen Kristallisationsdruck umgerechnet werden muss, so dass FLAC3D die Verformungen, deren Auswirkungen auf die Porosität und anschließend dann die Permeabilität berechnen kann. Fehler in der Berechnung des Kristallisationsdruckes machen sich demnach gleich zweifach in der Porosität bemerkbar und somit auch zweifach in der Permeabilität. Aus diesem Grund sollten die Messergebnisse für den Kristallisationsdruck und für den Kompressionsmodul bzw. Verformungsmodul nicht zu große Streubreiten aufweisen. Die in Kap. 3.4.3 vorgestellten Ergebnisse schwanken jedoch beträchtlich:

- Die gemessenen Verformungsmoduli schwanken im Zahlenwertbereich von  $EV = 280$  bis  $10000$  MPa und damit bis zu einem Faktor von etwa 35. Dazu kommt, dass die Messung integral für den gesamten Prüfkörper erfolgt. Für die lokalen Werte ist durch die starke Inhomogenität eine noch größere Streuung zu erwarten.
- Die über die Durchschallung dynamisch bestimmte Poissonzahl schwankt zwischen 0,26 bis 0,41.
- Der Endkristallisationsdruck schwankt zwischen  $PK = 6$  und  $96$  bar. Zudem ist die Aussagefähigkeit dieser Zahlenwerte bei einer Generalisierung stark herabgesetzt, da der Kristallisationsdruck nur lokal an einer Stelle gemessen wird.
- Der zeitliche Verlauf des Kristallisationsdruckes weist zwischen den Versuchen zum Teil markante Unterschiede auf, so dass sich ein einheitlicher Verlauf nur unzureichend mit mathematischen Funktionen beschreiben lässt.

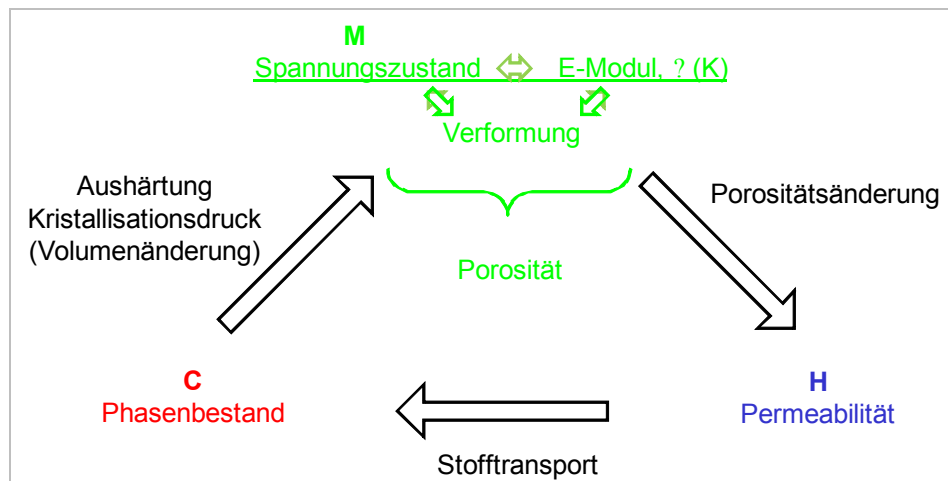
Angesichts dieser beträchtlichen Schwankungen ist die vorgeschlagene Kopplung EQ-Link-FLAC3D zwar im Grundsatz möglich, doch die Umsetzung ist aufgrund der beträchtlichen Streubreite der Messwerte so stark mit Unsicherheiten behaftet, dass die Realisierung dieser Kopplung nicht sinnvoll erscheint. Hinzu kommt, dass sich Fehler in den berechneten Porositäten (50 % bis 5 %) durch die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung stark potenziert auf die Permeabilitäten ( $10^{-10}$  bis  $10^{-20}$  m<sup>2</sup>) auswirken.

#### **5.4        Detaillierte Betrachtung des Aufsättigungsprozesses im Hinblick auf die Identifizierung der zentralen Parameter der Experimente und Simulationen**

Um einen neuen tragfähigen Ansatz für die Ausgestaltung der Kopplung zu finden, soll die C:HM-Kopplung so weit wie möglich vereinfacht werden, und es sollen nur die dafür unabdingbar notwendigen Parameter betrachtet werden. Diese Parameter sind in Tab. 5.2 aufgeführt, eingeteilt in die für eine Kopplung für unabdingbar notwendig erachteten Parameter und die Parameter, denen nur ein untergeordneter Einfluss zugeordnet wird. Gemeint sind damit Parameter, die zwar in die hydraulische oder mechanische Berechnung eingehen, jedoch nicht direkt an der Kopplung beteiligt sind wie z. B. die Viskosität des Fluids.

Die elementare Wechselwirkung bei der C:HM-Kopplung besteht demnach aus der phasenbestandsabhängigen Druck- und Porositätsänderung durch die chemischen Prozesse, der Porositätsänderung und daraus resultierenden Permeabilitätsänderung durch die Mechanik, dem Stofftransport in der Hydraulik und der Neuberechnung des Phasenbestandes in der Chemie.

Dieser schleifenartige Prozessablauf ist in Abb. 5.13 dargestellt. Am unproblematischsten lässt sich die Wechselwirkung der Hydraulik auf die Chemie berechnen, da hierbei keinerlei Modifikationen notwendig sind, sondern mit dem Lösungstransport nur die Lösungsmenge und die Lösungszusammensetzung übergeben wird. Die Wirkung der Mechanik auf die Hydraulik wird über eine Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung beschrieben, die für den SVV aufgestellt werden muss. Die Mechanik selbst beinhaltet im Gegensatz zu Hydraulik und Chemie eine interne Umrechnung von Spannungen in Verformungen über ein Stoffmodell. Die direkteste Wirkung von der Chemie auf die Mechanik ist dann möglich, wenn die Porosität und der Kristallisationsdruck unter den vorgegebenen Volumen- und Druckbedingungen mit dem geomechanischen Programm berechnet werden. Damit fällt der Schritt der Berechnung des Kristallisationsdruckes aus der Volumenänderung weg und Fehler in diesen Berechnungen fallen nicht mehr doppelt ins Gewicht. Eine derartige Kopplung ist mit FLAC3D jedoch nicht möglich, da hierzu ein Mehrphasenflusssystem benötigt wird und die Porosität aus dem chemischen Phasenbestand berechnet werden muss. Hinzu kommt, dass in EQ-Link keine zeitabhängigen Simulationen möglich sind. Ansonsten stellt dieser Kreislauf ein Grundgerüst dar, mit dem der Aushärtungsprozess beschrieben werden kann.



**Abb. 5.13** Schematische Skizze der Wechselwirkung C:HM über die entsprechenden Parameter

## 5.5 Vorüberlegungen zu den Möglichkeiten einer Kopplung EQLink-GeoSys

Aufgrund der vorstehenden Überlegungen sind weitere Arbeiten an der Kopplung EQLink-FLAC3D zurückgestellt worden. Alternativ wurde begonnen das Programmsystem GeoSys des Projektpartners ZAG zu testen, da mit GeoSys grundsätzlich die Möglichkeit besteht, eine Kopplung unter den vorstehend skizzierten Randbedingungen und Anforderungen zu realisieren.

Insgesamt bietet der Umstieg von FLAC3D auf GeoSys folgende Vorteile:

- Durch die relative Nähe zwischen der TUC und dem ZAG sind kurzfristig Rückfragen und Treffen möglich.
- GeoSys liegt als Open-Source-Code vor, wodurch grundsätzlich auch tief greifende Änderungen innerhalb des Programms möglich sind.
- Die TUC ist nunmehr aktiver GeoSys-Entwickler, der sich auf den Bereich Geomechanik spezialisiert.
- GeoSys ist in der Lage, einen Zwei- bzw. Mehrphasenfluss zu simulieren:
  - Der Kristallisationsdruck kann mit EQLink berechnet werden.
  - Die Porosität kann mit EQLink berechnet werden.
- GeoSys bietet Schnittstellen zu PhreeqC und GEMS:

- Vergleichsberechnungen zwischen verschiedenen Chemieprogrammen sind möglich.
- PhreeqC und GEMS unterstützen zeitabhängige Simulationen.
- Die mechanischen und teilweise hydraulischen Ergebnisse von GeoSys können durch FLAC3D verifiziert werden.

Allerdings besteht der Nachteil, dass in GeoSys (noch) nicht die eigentlich mechanisch spezifischen Prozesse für das Salinargebirge implementiert sind. Insgesamt bietet GeoSys neben der Erfüllung der Voraussetzungen für die oben vorgeschlagene C:HM-Kopplung auch noch weitere, oben angeführte, Vorteile. Aus diesem Grund wurde eine Zusammenarbeit der TUC und dem UFZ begonnen, um einerseits zu erkunden, ob dieses Projekt vorteilhaft mit GeoSys als hydraulisch-mechanischem Simulator weiter geführt werden kann und andererseits, um zukünftig Programmsysteme wie FLAC3D und GeoSys im HM-Bereich und ChemApp, GEMS und PhreeqC im chemischen Bereich zur Verfügung zu haben, die auch einen Vergleich der Ergebnisse untereinander ermöglichen.

Bei jeder physikalischen Modellierung und numerischen Simulation von zentraler Bedeutung ist die Validierung der Ergebnisse anhand von Experimenten. Aus diesem Grund sind in Tab. 5.2 die chemischen, hydraulischen und mechanischen Parameter mit Angaben dahingehend aufgelistet, in wie weit sie in Experimenten erfasst werden. Dazu werden drei verschiedene Zustände unterschieden und zwar der Startzustand, der Zustand während des Aushärtungsprozesses und der Endzustand.

Auffallend im Vergleich ist, dass lediglich der Startzustand hinsichtlich der aufgeführten Parameter sehr gut definiert ist. Hier sind alle Parameter hinreichend genau bekannt. Während der Aushärtungsphase dagegen sind sämtliche Parameter unbekannt bis auf den Kristallisationsdruck, der jedoch nur lokal an einer Stelle gemessen wird, sodass nur begrenzt Rückschlüsse auf den integralen Kristallisationsdruck und noch weniger auf die lokale Verteilung des Kristallisationsdruckes möglich sind. Der Endzustand ist durch die Bestimmung der mechanischen und der hydraulischen Parameter in den anschließend durchgeführten Kurzzeitbelastungsversuchen besser bekannt; jedoch liefern die Kurzzeitversuche jeweils nur integrale Messwerte für den gesamten Prüfkörper. Dazu kommt, dass der mit Bezug auf die Umsetzung des Forschungsprojektes in eine praxisbezogene Anwendung wichtigste Parameter, der Kristallisationsdruck, nur punktuell erfasst wird und somit ein Rückschluss auf die als inhomogen zu erwartende

Kristallisationsdruckverteilung nicht möglich ist. Auch die mineralogische Zusammensetzung lässt sich mit dem von der GRS benutzten Verfahren nur mit sehr großem Aufwand in größerer Auflösung bestimmen, da der Prüfkörper hierbei in die entsprechenden Stücke zerteilt werden müsste. Sie ist eine rein qualitative Methode, die angibt, welche Phasen im untersuchten Bereich vorkommen und welche nicht. Eine strenge Validierung der Modellierung und Simulation ist damit, unabhängig von den Randbedingungen oder der verwendeten Software, nicht möglich, sondern lediglich nur Effektstudien.

**Tab. 5.2** Übersicht über den Kenntnisstand der wichtigsten Parameter zu Beginn, während und am Ende der Aushärtung

| Prozess     | Parameter                 | Startzustand | Aushärtung | Endzustand                     |
|-------------|---------------------------|--------------|------------|--------------------------------|
| Mechanisch  | E-Modul                   | ☑            | ?          | integral                       |
|             | $\nu$                     | ☑            | ?          | integral                       |
|             | Kompaktion                | ☑            | ?          | integral                       |
|             | Porosität                 | ☑            | ?          | integral                       |
|             | (Kristallisations-) Druck | ☑            | punktuell  | punktuell                      |
| Hydraulisch | Permeabilität             | ☑            | ?          | integral                       |
|             | Viskosität                | ☑            | ?          | ?                              |
| Chemisch    | Phasenbestand             | ☑            | ?          | qualitativ an Ein- und Auslass |

## 5.6 Implementierung des Stoffmodells und der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung in MISES3

Wie in Kap. 5.1.2 dargelegt, wurde EQLINK über die Subroutine SVVI in MISES3 implementiert. Diese Subroutine sollte unter anderem das Stoffmodell und die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für SVV enthalten. Aufgrund der in Kap. 5.2 dargelegten Zieländerungen des Projektes war eine Kopplung MISES3-EQLINK jedoch nicht mehr zielführend und wurde zugunsten der anderen, zusätzlichen Arbeitspakete nicht mehr weiterverfolgt.

## 5.7 Diskussion und Zusammenfassung

Zunächst wurde das Programm EQlink über Subroutinen in das FEM-Programm MISES3 implementiert, wobei über die Subroutinen gleichzeitig die Grundstruktur für die Implementierung des Stoffmodells gelegt wurde. Mit dem gekoppelten System MISES3-EQULINK wurde anschließend der Aufsättigungsprozess unter der Annahme einer ideal homogenen Verteilung der NaCl-Lösung im Versatz simuliert. Die Ergebnisse dieser homogenen Aufsättigung haben sich dabei als wenig realistisch erwiesen, da weder eine Volumenausdehnung stattfand, noch eine dem Experiment vergleichbare Phasenverteilung vorlag. Realistischere Werte lieferte die Simulation einer inhomogenen Aufsättigung einer Strecke mit 20 Zonen. Die Auswertung der Berechnungsergebnisse zum Ende der Aufsättigung zeigte eine vergleichbare Phasenverteilung wie die Messungen des Phasenbestands von der GRS, eine Volumenvergrößerung über das ursprüngliche Zonenvolumen, und dass es beim Lösungszufluss zu einer Volumenverkleinerung, entsprechend den Auflösungserscheinungen an der Einlassseite kommt.

Die Simulation einer inhomogenen Aufsättigung hat jedoch auch gezeigt, dass der Aufsättigungsprozess deutlich komplexer ist als erwartet. So ist z. B. das Vordringen der Lösung in den Prüfkörper von großer Bedeutung und muss in der Simulation berücksichtigt werden. Mit dem Programmsystem MISES3 ist dies ohne tiefgreifende Änderungen nicht möglich, da weder die Berechnung eines Massentransports in der flüssigen Phase noch die eines Aufsättigungsprozesses möglich ist. Alternativ wurde daher der Umstieg auf die Software FLAC3D erwogen, mit der grundsätzlich Aufsättigungsprozesse berechnet werden können und zu Testzwecken die Aufsättigung einer Strecke berechnet wurde. Ein weiteres Ergebnis der Simulation der inhomogenen Aufsättigung ist, dass ein Hydratisierungsgrad nicht wie geplant definiert werden kann. Ursache hierfür ist zum einen die Komplexität der Phasenbestandsverläufe. So ist im ausgehärteten Zustand kaum eine Zone komplett hydratisiert, in jeder Zone liegt ein anderer Phasenbestand vor, und es kommt zur Auflösung von festen Materialphasen. Notwendig ist folglich eine C:HM-Kopplung, die ohne einen Hydratisierungsgrad auskommt und die die Veränderung der mechanischen und hydraulischen Parameter aufgrund chemischer Prozesse direkter abbildet.

Um eine solche C:HM-Kopplung zu realisieren, wurde im Folgenden ein Konzept mit der Software FLAC3D entwickelt. In diesem Konzept ist eine direkte Kopplung der Prozesse  $M \Rightarrow H \Rightarrow C$  vorgesehen. Lediglich die Kopplung von C nach M erfolgt über einen Zwischenschritt, in dem die Volumenänderungen über das Kompaktionsmodul in



Spannungsänderungen umgerechnet werden. Programmtechnisch erscheint eine solche C:HM-Kopplung mit FLAC3D möglich, doch fließen in die Umrechnung der Volumenvergrößerung in Spannungen als Messwerte die Verformungsmoduli, die dynamische Poissonzahl, der Endkristallisationsdruck und der zeitliche Verlauf des Kristallisationsdruckes mit ein. All diese Messwerte weisen dabei eine große Streubreite auf (Kap. 3.4.3.1), so dass die numerische Berechnung, in der diese Werte mathematisch verknüpft sind, mit so großen Unsicherheiten behaftet ist, dass diese Kopplung nicht sinnvoll erscheint.

Für die Simulation des Aufsättigungsprozesses erscheint demnach eine direkte C:HM-Kopplung ohne die Umrechnung der Volumenvergrößerung in Spannungsänderungen notwendig. Um festzustellen, wie eine solche C:HM-Kopplung grundsätzlich realisierbar ist, werden zunächst die C:HM-Kopplung und die Kopplungsparameter theoretisch betrachtet und die Kopplung dabei möglichst vereinfacht. Als Ergebnis dieser Betrachtungen erscheint eine C:HM-Kopplung mit CHEMAPP grundsätzlich möglich, indem mit der chemischen Software CHEMAPP mit einem konstanten Volumen als Randbedingung gerechnet wird. Diese Berechnungen sind ohne Verwendung einer Gasphase jedoch problematisch, so dass für die Berechnung der chemisch bedingten Druckänderungen ein Programmsystem erforderlich ist, das in der Lage ist, zusätzlich zu den mit FLAC3D berechenbaren HM-Prozessen auch einen Zweiphasenfluss zu berechnen.

Mit GeoSys liegt beim Projektpartner UFZ ein Programmsystem vor, in das zwar nicht die mechanisch spezifischen Prozesse für Salinargebirge implementiert sind, aber das in der Lage ist, einen Zweiphasenfluss zu berechnen. Deshalb wurde eine Zusammenarbeit der TUC und dem UFZ begonnen, um zu erkunden, ob dieses Vorhaben mit GeoSys als Programmsystem weitergeführt werden kann.

Im weiteren Verlauf hat sich bei einer Validierung der Ergebnisse einer C:HM-gekoppelten Simulation des Aufsättigungsprozesses herausgestellt, dass diese nicht möglich ist. Ursache hierfür ist, dass die Parameter zwar zum Startzustand sehr gut bekannt sind, aber im Endzustand größtenteils nur integral vorliegen und während der Aushärtung bis auf den Kristallisationsdruck, der auch nur lokal gemessen wird, gänzlich unbekannt sind. Somit ist eine strenge Validierung unabhängig von den Randbedingungen oder der verwendeten Software nicht möglich.



## **6 Modellierung eines in-situ-Versuchs zur Aufsättigung eines vertikalen, mit SVV verfüllten Bohrlochs**

Neben Abdichtungs- und Verschlussbauwerken wie Versatzdämmen, Dammbauwerken und Schachtverschlüssen haben Bohrlochverschlüsse eine gewisse Relevanz für Untertagedeponien, Versatzbergwerke und Endlager. Im Folgenden soll daher exemplarisch der Verschluss von Bohrlöchern untersucht werden.

### **6.1 Grundgedanken zu Bohrlochlagerung**

Das Konzept der Einlagerung gefährlicher Abfälle in vertikalen Bohrlöchern ist speziell für die Endlagerung im Salzgestein vorgesehen. Diesem Konzept entsprechend werden mehrere Strecken parallel nebeneinander aufgefahren und von den Sohlen dieser Strecken ausgehend Bohrlöcher abgeteuft. In einer salzstockartigen Lagerstätte wird für die vertikalen Bohrlöcher eine Länge von 250 – 300 m veranschlagt.

Nachfolgend soll auf den Verschluss der Bohrlöcher eingegangen werden. Dieser Verschluss soll hier mit SVV als Verschlussmaterial realisiert werden, wobei verschiedene Methoden der Verschlussherstellung berücksichtigt werden.

Die vertikale Anordnung der Bohrlöcher hat im Gegensatz zu einer horizontalen Anordnung von Bohrlöchern oder auch von Ablagerungsstrecken den Vorteil, dass der Versatz der zwischen den Abfallgebinden verbleibenden Hohlräume technisch einfacher und homogener realisiert werden kann. Dieser Vorteil gilt auch für den Bohrlochverschluss mit dem Verschlussmaterial SVV, unabhängig davon, ob der SVV trocken, aufgesättigt oder angemischt eingebracht wird. Wichtig für die abdichtende Wirkung des Verschlusses sind nicht nur die Homogenität und die geringe Porosität und damit die geringe bis verschwindende Permeabilität des Verschlussmaterials, sondern die Permeabilität des Abdichtungssystems insgesamt, das aus dem Verschlussmaterial und der Auflockerungszone des Bohrloch konturnahen Gebirges besteht. Dabei ist davon auszugehen, dass sich die Bohrlöcher in Teufen von 800 – 1100 m befinden und trocken gebohrt werden, so dass sie konturnahe unter atmosphärischem Innendruck stehen. Damit ist davon auszugehen, dass sich eine Auflockerungszone ausbildet, die wegen der Unzugänglichkeit der Bohrlöcher weder beräumt noch regelmäßig

hinsichtlich ihrer Intensität inspiziert werden kann. Mechanische und hydraulische Eigenschaften der Auflockerungszone sind damit rechnerisch einzuschätzen, insbesondere hinsichtlich ihrer zeitlichen Entwicklung. Diese ist insbesondere davon geprägt, dass sich nach Abfallablagerung und Versatzeinbau konvergenzbedingt ein Stützdruckaufbau ergibt, der vice versa zu einer Rückbildung der Schädigungszone führt.

Unterstützt wird der Kompaktions- bzw. Stützdruckaufbau durch den Aufbau eines Kristallisationsdruckes, der sich bei Lösungszutritt durch die Aushärtung des SVV ausbilden kann. Der Zutritt der Lösung kann dabei technisch oder natürlich bedingt sein. Im ersten Fall ist der Zeitpunkt vorbestimmt, im zweiten Fall unbestimmt. Inwieweit der eine oder andere Fall zu bevorzugen ist, muss aus sicherheitstechnischer Sicht beurteilt werden und ist z. B. auch davon abhängig, in welcher Zeit der Bohrlochverschluss ohne künstliche Aufsättigung seine Funktionstüchtigkeit erreicht.

## **6.2 Grundlagen der Modellierung**

### **6.2.1 Ablaufschema der numerischen Berechnungen zur Simulation des Bohrlochverschluss-Tragverhaltens**

Um die Eignung von SVV als Verschlussmaterial für Bohrlöcher zu testen, wurde von der GRS im Rahmen eines andere Vorhabens (Qualifizierung von Strömungsbarrieren in Salzformationen, Kurztitel SVV-2, Fördernummer 02 C 1335) ein in-situ-Versuch durchgeführt, bei dem ein Bohrloch mit SVV verfüllt und anschließend mit einer Tachhydritlösung geflutet wurde. Im Projektantrag war geplant, den Versuch begleitend numerisch zu untersuchen, insbesondere im Hinblick auf die mechanischen Eigenschaften und die Auswirkungen des SVV auf das Tragverhalten des Bohrloches. Nach den bisherigen Erkenntnissen erscheint jedoch die Analyse des Tragverhaltens eines Bohrloches mit SVV-Verschluss im Rahmen eines idealisierten Modells und unabhängig von dem GRS-Versuch aus folgenden Gründen aufschlussreicher zu sein:

- Der SVV wurde nicht mit einer NaCl- sondern einer Tachhydritlösung geflutet, welche beträchtliche Mengen an  $MgCl_2$  und  $CaCl_2$  enthält. Somit sind die Parameter, die aus mit NaCl-Lösung aufgesättigtem oder angemischtem SVV abgeleitet wurden, nicht unmittelbar übertragbar.
- Der Versuchsort auf der 574 m-Sohle in der Asse liegt in der Nähe von anderen Hohlräumen, die die Gebirgsspannungen am Versuchsort beeinflussen. So verläuft

z. B. 12 m unter der Strecke, in der der Versuch durchgeführt wurde, eine weitere Strecke mit lediglich 6 m Abstand zu der Bohrlochsohle. Die Berücksichtigung dieser Einflüsse hätte ein komplexes geometrisches Modell zur Folge, das nicht nur zu deutlich längeren Programmier- und Rechenzeiten führen würde, sondern durch die komplexeren Spannungszustände voraussichtlich auch eine geringere Aussagekraft hätte im Hinblick auf die Generalisierung der Ergebnisse.

- Der in-situ-Versuch wurde nicht im Steinsalzgebirge, sondern in einem carnallitisch geprägten Gebirge durchgeführt. Die Modellierung von Carnallitgestein ist im Vergleich zu der Modellierung von Steinsalz ungleich schwerer, da Carnallit innerhalb kurzer Zeit verwittert, gegenüber Steinsalz eine leichtere Löslichkeit aufweist und die vorhandenen Stoffmodelle nicht in dem Umfang belegt sind wie die für Steinsalz.
- Ziel der Simulation der Bohrlochlagerung ist es, eine Prognose des Langzeittragverhaltens von einem mit SVV versetzten Bohrloch zu erstellen. Der in-situ-Versuch dagegen soll die prinzipielle Machbarkeit eines Bohrlochverschlusses mit SVV demonstrieren und ist mit einer Laufzeit von Monaten nicht repräsentativ für eine Beurteilung über hundert und mehr Jahre, insbesondere wird auch nicht der abfallbedingte Temperatureinfluss erfasst.

Der zuletzt aufgeführte Aspekt hat unter anderem auch zur Folge, dass sich der zeitliche Ablauf des in-situ-Versuches vom wahrscheinlichen Ablauf im Konzept der Bohrlochlagerung unterscheidet. Im in-situ-Versuch liegen für die Strecke sehr lange Standzeiten, für das Bohrloch dagegen vernachlässigbare Standzeiten vor. In einem Endlager ist davon auszugehen, dass zwischen Auffahrung der Strecke, Abteufen des Bohrlochs, Abfalleinlagerung und Versetzen der Resthohlräume nur so große Zeiträume vergehen, wie sie für die bergbautechnischen Tätigkeiten und die Einbringung des Abfalls benötigt werden. Diese Zeiträume bestimmen jedoch maßgeblich die Konvergenz des Gebirges und so auch den Kompaktionsdruck, der auf den Bohrlochverschluss wirksam wird. Um diesen Ablauf näherungsweise in realistischen Zeiten zu simulieren, wurde für die Berechnungen das in Tab. 6.1 entwickelte zeitliche Ablaufschema verwendet.

Das zeitliche Ablaufschema für die Simulation der Bohrlochlagerung beginnt nach Tab. 6.1 mit der Einprägung des primären Gebirgsspannungszustandes in das Berechnungsmodell und dem Ausbruch der Strecke, der den zeitlichen Nullpunkt darstellt. Der Ausbruch erfolgt instantan, wobei der räumliche Vortrieb vernachlässigt wird. Bis zum Abteufen des Bohrlochs wird von einer Standzeit der Strecke von 3 a ausgegangen. Zu

diesem Zeitpunkt wird das Bohrloch komplett instantan ausgebrochen und dabei die Zeit, die zum Abteufen benötigt wird, vernachlässigt. Nach 2 a Standzeit wird das Bohrloch durch instantanes Einbringen des Verschlussmaterials verschlossen. Je nach technischer Vorgehensweise sind hier Variationen möglich. Nach 5 a Beobachtungszeit wird die Strecke abschließend mit Salzgrus verfüllt, ebenfalls momentan. Von diesem Zeitpunkt an wird dieser Teilbereich des Endlagers sich selbst überlassen, und es werden keine weiteren technischen Eingriffe mehr vorgenommen. Konvergenz, Temperaturentwicklung, Kristallisationsdruckentwicklung, Kompaktionsdruckentwicklung und die daraus folgende Reduktion des Porenraumes im Bohrlochverschluss und im Versatz der Strecke und die Rückbildung der konturnahen Gefügeschädigung sind nunmehr autonom auftretende Prozesse. Zur Dokumentation des zeitlichen Verlaufs dieser Prozesse wird der berechnete Tragwerkszustand nach 10, 20, 30, 50, 75 und 100 a betrachtet.

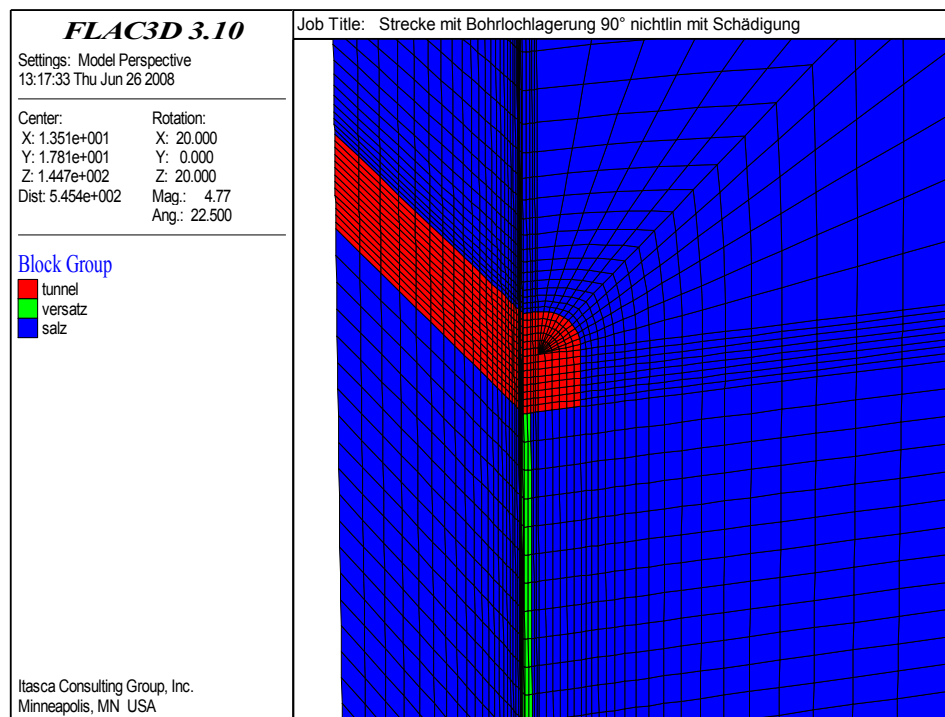
**Tab. 6.1** Zeitliches Ablaufschema für die Simulation der Bohrlochlagerung mit Bohrlochverschluss

| Zeitpunkt | Ereignis  |
|-----------|---|
| 0a        | Ausbruch der Strecke  |
| 3a        | Ausbruch des Bohrlochs  |
| 5a        | Verfüllen des Bohrlochs mit SVV                               |
| 10a       | Verfüllen der Strecke mit Salzgrus                            |
| 20a       | Konvergenz des Gebirges/Stützdruckaufbau                      |
| 30a       | Konvergenz des Gebirges/Stützdruckaufbau                      |
| 50a       | Konvergenz des Gebirges/Stützdruckaufbau                      |
| 75a       | Konvergenz des Gebirges/Stützdruckaufbau                      |
| 100a      | Konvergenz des Gebirges/Stützdruckaufbau, Ende der Berechnung |

### 6.2.2 Geometrisches Modell

Das für die Analyse des Tragverhaltens entwickelte geometrische Modell ist in Abb. 6.1 dargestellt. Es besteht unter Ausnutzung von Symmetriebedingungen aus einem blockartigen 3D-Gebirgskörper mit einer horizontalen Strecke mit einer Breite von  $b = 8$  m und einer Höhe von  $h = 7$  m sowie einem 50 m tiefen Bohrloch, das einen Durchmesser von  $d = 1$  m aufweist und von der Streckensohle aus geteuft wird. Das Bohrloch ist mit 50 m Länge deutlich kürzer als im Konzept der Bohrlochlagerung geplant. Da hier nur der Verschluss untersucht werden soll und nicht der mit Versatz und Kokillen verfüllte Bereich des Bohrlochs, erscheint die Länge ausreichend. Das Bohrloch

wird im Modell komplett mit dem jeweiligen Verschlussmaterial verfüllt, so dass Bohrlochverschlüsse mit bis fast 50 m Länge betrachtet werden können.



**Abb. 6.1** Geometrisches Modell für die Bohrlochlagerung

Bei der Modellbildung wird die Symmetrie des Tragsystems angesichts der zweiachsigen Symmetrie entlang von Vertikalebene ausgenutzt und nur ein 90°-Ausschnitt des relevanten Gebrigsbereiches in das Berechnungsmodell übernommen. Die Lage des Koordinatensystems wurde so gewählt, dass die z-Achse mit der Bohrlochachse zusammenfällt und die y-Achse parallel zur Strecke verläuft. Das Modell erstreckt sich jeweils 40 m in x- und y-Richtung und ist insgesamt 190 m hoch. Die Strecke befindet sich dabei in einer Teufe von  $z = 800$  m.

An dieser Stelle soll noch vermerkt werden, dass aus Abb. 6.1 bereits hervorgeht, dass die Diskretisierung im Bereich der Streckenecke nicht optimal ist, was zu weniger realistischen Rechenergebnissen in diesem Bereich führen kann. Realitätsnähere Ergebnisse könnten durch eine stärkere Ausrundung des Eckbereiches erreicht werden. Hier wird darauf in Anbetracht dessen, dass das Hauptinteresse der Analyse auf dem Tragverhalten des Bohrloches liegt und sich die numerisch weniger guten Ergebnisse auf den Bereich der Streckenecke beschränken, verzichtet, um das Modell im Hinblick auf die Diskretisierung einfacher und die Zonenzahl möglichst geringer zu halten.

### **6.2.3      Physikalische Modelle und Materialparameter**

Für die Modellierung des Steinsalzgebirges wird das Stoffmodell HOU/LUX mit dem Parametersatz für Asse-Steinsalz aus [EBZ 06] verwendet, siehe Tab. 8.2. Für den Streckenversatz und für den Bohrlochversatz bei angemischtem SVV wird das Stoffmodell Korthaus/Hein aus [KOR 98] verwendet.

Die Ermittlung der Parameter für den angemischten SVV ist in Kap. 4.1.2 dargelegt. In Tab. 4.1 sind die Parameter für angemischten SVV und für Salzgrus vergleichend zusammengestellt. Der aufgesättigte SVV wird als Material mit linear-elastischem Stoffverhalten angenähert und mit dem Stoffmodell Hooke abgebildet, wobei durchschnittliche Zahlenwerte von  $E = 22.200 \text{ MPa}$  und  $\nu = 0,31$  verwendet werden.

### **6.2.4      Fallunterscheidung**

Vorrangiges Ziel bei der Endlagerung gefährlicher Abfälle ist der langfristige und nachsorgefreie Abschluss von der Biosphäre. Dieses Ziel wird in diesen Konzepten bei Normalentwicklung des Deponiesystems bereits durch das verschlossene Grubengebäude mit Abdichtungselementen wie z. B. Salzbarrieren, Streckenverschlussbauwerken und Schachtverschlussbauwerken gewährleistet. Somit ist zunächst nicht davon auszugehen, dass die in den Bohrlöchern abgelagerten Abfälle mit Lösungen von außen in Kontakt kommen. Die Anordnung von Bohrlochverschlüssen ist folglich eine zusätzliche Sicherheitsmaßnahme im Rahmen des Mehrfachbarrierensystems, die erst im Fall der nicht normalen und damit gestörten Entwicklung des Deponiesystems ihre Funktion ausüben muss. Denkbar sind hier Lösungszutritte aus nicht identifizierten Salinar internen Reservoirs (sog. Laugennester) in Nähe eines Bohrlochs oder Lösungen von außen, die die übrigen Barrieren überwunden haben. Unabhängig von der Herstellungsmethode muss der als Bohrlochverschlussmaterial eingesetzte SVV als Teil des Mehrbarrierensystems somit sowohl in der Normalentwicklung wie auch in der gestörten Entwicklung seine abdichtende Funktion erfüllen. Zu diskutieren ist dabei allerdings der Zeitpunkt, zu dem ein funktionstüchtiger Bohrlochverschluss aus SVV vorliegen muss. Unabhängig davon, ob im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises der Lösungszutritt der normalen oder einer gestörten Entwicklung zugeordnet wird, sind für einen Lösungszutritt die folgenden grundsätzlichen Möglichkeiten zu sehen:



- Absaufen der Strecke bzw. der untertägigen Entsorgungseinrichtung und Vordringen der Lösung bis zum Bohrlochverschluss, (unerkanntes) Laugennest in der Nähe des Bohrlochs und Zutritt von Lösungen in das Bohrloch.
- Die zu fordernde (mechanische und) hydraulische Anfangsqualität des SVV hängt davon ab, welche Funktion dem Bohrlochverschluss im Rahmen des Sicherheitskonzeptes zugewiesen wird. Umgekehrt ist es allerdings auch denkbar, die Bedeutung des SVV als Bohrlochverschluss im Sicherheitskonzept entsprechend der hydraulischen Qualität des Bohrlochverschlusses mit seinem Zeitverlauf festzulegen. Daher sollen hier die verschiedenen Optionen, die aus technologischer Sicht bei Einsatz von SVV bestehen, nebeneinander analysiert werden.

Für die Einbringung von SVV als Verschlussmaterial können im Grundsatz die folgenden drei Methoden unterschieden werden:

- Der SVV wird lagenweise trocken eingebracht und verdichtet.
- Der SVV wird beim Einbringen in das Bohrloch mit NaCl-Lösung gemischt (denkbar ist hier ein ähnliches Verfahren wie bei Spritzbeton mit Zugabe der Salzlösung in der Austrittsdüse des Transportschlauches).
- Der SVV wird lagenweise trocken eingebracht und auch lagenweise definiert (vorgegebene Lösungsmenge) aufgesättigt.

Um die einzelnen Methoden zur Einbringung des SVV als Bohrlochverschlussmaterial beurteilen zu können, muss das je nach Einbringungsmethode mit unterschiedlichen Eigenschaften entstehende SVV-Material bezüglich seiner Funktion als Abdichtungselement in der Normalentwicklung und in der gestörten Entwicklung eines Endlagers untersucht werden. Insgesamt gibt es formal folglich 6 verschiedene Fälle, für die der SVV mit seinen abdichtenden Eigenschaften untersucht und bewertet werden muss. Im Projektantrag war nur die Untersuchung des bei Herstellung künstlich aufgesättigten SVV ohne weiteren Lösungszutritt vorgesehen, da sich die anderen Fälle zum Teil erst während des Projektes ergeben haben, z. B. aus der Entwicklung einer neuen Methode zur Prüfkörperherstellung. Eine vollständige systematische Behandlung aller Fälle war im Rahmen dieses Projektes weder zeitlich möglich, noch standen ausreichende laborative Untersuchungsbefunde zur Verfügung. Im Folgenden wird jedoch, soweit es der Rahmen dieses Forschungsprojektes erlaubt, auch auf weitere Fälle eingegangen.

#### **6.2.4.1      Trockener (wasserfreier) SVV – kein Lösungszutritt**

Die Untersuchung von trockenem wasserfreiem SVV als Bohrlochverschlussmaterial war im Projektantrag nicht vorgesehen. Daher kann dieser Fall in Ermangelung von laborativen Untersuchungen und Befunden nur kurz betrachtet werden. Im Gegensatz zu angemischtem oder aufgesättigtem SVV ist der wasserfreie SVV technisch einfacher einzubringen, da er weder möglichst homogen aufgesättigt werden muss noch anzumischen und rechtzeitig vor Einsetzten der exothermen Reaktion mit entsprechender Aushärtung einzubringen ist. Zusätzlich können ein homogener Einbau und eine gewisse Verdichtung gewährleistet werden. Im Grundsatz sollte sich der wasserfreie SVV ähnlich verhalten wie verdichteter Salzgrus und somit nach dem Einbau das Kompaktionsverhalten eine dominante Bedeutung haben. Inwieweit sich das Kompaktionsverhalten des SVV von dem Kompaktionsverhalten von Salzgrus unterscheidet und inwieweit das trocken eingebrachte und verdichtete SVV-Material kriechfähig ist, muss für eine weitere detailliertere Betrachtung zunächst laborativ ermittelt werden.

#### **6.2.4.2      Angemischter SVV – kein Lösungszutritt**

Das Materialverhalten des angemischten SVV weist ein ausgeprägtes Kompaktionsverhalten auf (Kap. 3.5). Zur physikalischen Modellierung des angemischten SVV wurde das Stoffmodell Korthaus/Hein vorgesehen. Die erforderlichen Materialparameter wurden wie in Kap. 4.1.2 beschrieben ermittelt. Zusätzlich ist für den angemischten SVV eine (allerdings noch wenig belegte) Beziehung zwischen Porosität und Permeabilität entwickelt worden (Kap. 5.2).

Somit stehen für den angemischten SVV ein mechanisches Stoffmodell inklusive Parametern und eine Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung zur Verfügung, die zusammen eine mechanisch-hydraulische Simulation des SVV-Verhaltens erlauben und es ermöglichen, die abdichtende Wirkung des in das Bohrloch eingebrachten SVV in ihrer Zeitabhängigkeit zu berechnen (Kap. 4.2).

#### **6.2.4.3      Aufgesättigter SVV – kein Lösungszutritt**

Der Aufsättigungsprozess verläuft zumindest nach den in Kap. 5 geschilderten Untersuchungen eher unregelmäßig und führt dementsprechend in der Tendenz zu einem mineralogisch und möglicherweise auch zu einem gefügebezogen inhomogenen Mate-

rialaufbau. Dementsprechend erscheint eine physikalische Modellierung aufgrund von laborativen Untersuchungen an Prüfkörpern mit den üblichen Abmessungen nur näherungsweise möglich. Allerdings ist nicht auszuschließen, dass bei einem Upscaling die kleinräumig erkennbaren Imperfektionen im Gefüge verschmiert werden und insgesamt von einer Quasihomogenität ausgegangen werden kann. In diesem Kapitel wird der aufgesättigte SVV deshalb hypothetisch als quasihomogen betrachtet und stark idealisiert mit seinen mechanischen Eigenschaften in die numerischen Simulationen eingebracht. Ziel ist es an dieser Stelle daher weniger, präzise Aussagen über das mechanische Verhalten des SVV zu erarbeiten als vielmehr, die Auswirkungen eines mittleren (integralen) Kristallisationsdruckes auf das Tragverhalten des umgebenden Gebirges zu analysieren.

Für die Berechnungen wird somit davon ausgegangen, dass sich der SVV im Lauf der Zeit auch durch weiterlaufende geochemische Prozesse homogenisiert und deshalb in Zusammenhang mit dem Upscaling ein statistisch homogenes Materialverhalten vorliegt. Messungen haben gezeigt, dass der aufgesättigte SVV tendenziell eher eine höhere Festigkeit aufweist als der angemischte SVV bzw. Steinsalz. Die Porosität kann nach Angaben von der GRS bei Verwendung von nicht-NaCl-Lösung bei umfassender Aufsättigung mit  $\phi = 1 \%$  deutlich geringer ausfallen als bei dem angemischtem SVV. Eine weitere Kompaktion nach Einbau durch Gebirgskonvergenz wäre somit nur noch in geringem Maße möglich. Das Kompaktionsverhalten wird in den Berechnungen daher vernachlässigt. Durch die höhere Steifigkeit des aufgesättigten SVV dürfte sein Kriechverhalten im Vergleich zu dem Kriechverhalten von angemischtem SVV bzw. Steinsalz eher gering sein. Aufgrund dieser Hypothese und der Tatsache, dass Kriechdeformationen im Bohrlochversatz nur eingeschränkt möglich sind, wird auch auf die Modellierung des Kriechverhaltens verzichtet und der Versatz grob vereinfacht lediglich als linear-elastisches Material betrachtet. Als Materialparameter werden gemittelte Messwerte aus den Laborversuchen herangezogen.

#### **6.2.4.4 Wasserfreier SVV – undefinierter Lösungszutritt**

Falls es bei einem trocken eingebauten und verdichteten SVV zu einem undefinierten Zutritt von Lösung kommen sollte, muss davon ausgegangen werden, dass der Zutritt unterschiedliche Ursachen haben kann, allerdings jedoch die dadurch induzierten grundlegenden Prozesse von der Ursache des Lösungszutritts nur untergeordnet abhängen. Da die Lösungen zumindest im Lauf der Zeit voraussichtlich sowohl bei exter-

nem wie internem Lösungszutritt unter angehobenem Druck in den SVV gepresst werden, sind Sickerprozesse eher von untergeordneter Bedeutung und es wird davon ausgegangen, dass keine prinzipiellen Unterschiede im Prozess der Aufsättigung von unten im Vergleich zu der Aufsättigung von oben bestehen. Allerdings ist der Zeitpunkt des Lösungszutritts ebenso unbekannt wie der Zeitablauf.

Die bei einer definierten Aufsättigung auftretenden Prozesse sind bereits sehr komplex. Im Fall einer undefinierten Aufsättigung wird diese Komplexität nochmals deutlich erhöht, da eine Reihe von weiteren Unbekannten auftritt wie z. B.

- die Zusammensetzung der Lösung,
- der zeitliche Verlauf der Aufsättigung,
- der Injektionsdruck und dessen zeitlicher Verlauf,
- die Porosität des wasserfreien SVV zum Zeitpunkt des Lösungszutritts und
- der mechanische und hydraulische Zustand des SVV (Kompaktionsdruck, Porosität, Permeabilität).

Somit ist dieser Fall nicht ohne weiteres in seinen Randbedingungen zu präzisieren. Es kann hier nur auf das grundsätzliche Bestreben des SVV verwiesen werden, Wasser aus wässrigen Lösungen chemisch zu binden und dabei das Festvolumen zu vergrößern. Somit liegt die grundsätzliche Tendenz vor, bei Lösungszutritt den Porenraum zu verringern, einen Kristallisationsdruck aufzubauen und den Bohrlochquerschnitt weiter abzudichten.

#### **6.2.4.5 Angemischter SVV – undefinierter Lösungszutritt**

Die laborativen Untersuchungen mit angemischtem SVV haben ergeben, dass dieser bereits kurze Zeit nach dem Anmischen gegenüber Stickstoff eine sehr geringe Permeabilität von  $K < 10^{-21} \text{ m}^2$  aufweist. Das hohe Kompaktionsvermögen sowie die Eigenschaften, Risse schnell zu schließen und große Verzerrungen bruchlos zu ertragen, führen dazu, dass diese Permeabilität im Lauf der Zeit mindestens erhalten bleibt bzw. wahrscheinlich sogar noch weiter abnimmt. Gegenüber NaCl-Lösung und damit vermutlich auch gegen NaCl-Lösungen, in denen noch weitere gesättigte oder teilgesättigten Phasen enthalten sind und die somit im Allgemeinen eine geringere Löslichkeit aufweisen, bleibt diese geringe Permeabilität bestehen. Kurz- und mittelfristig

bleibt somit die Dichtheit des Verschlusses gegenüber zutretenden Lösungen gewährleistet.

Auch im Falle einer mechanischen Beanspruchung, die eine Schädigung des Versatzgefüges mit Sekundärrissbildung zur Folge haben könnte, stellt sich die Dichtheit des Versatzmaterials voraussichtlich relativ schnell wieder her. Nicht untersucht wurden allerdings die mechanische Schädigung unter NaCl-Lösungsdruck und die Schädigung des Versatzmaterials durch unter Druck stehende Lösungen (druckgetriebene Infiltration). Hier sollte noch ausgeschlossen werden, dass die Porenlösung ein Verschließen der Risse bei ansteigendem Kompaktionsdruck verhindert.

#### **6.2.4.6 Aufgesättigter SVV – undefinierter Lösungszutritt**

Die aufgesättigten SVV-Prüfkörper sind zwar zum Teil inhomogen aufgebaut, doch besitzen sie üblicherweise in Längs- und in Querrichtung zumindest einen durchgehend ausgehärteten Bereich, der eine geringe Permeabilität aufweist. Somit kann davon ausgegangen werden, dass nach der Aushärtung insbesondere bei Berücksichtigung des positiven Upscaling-Effektes ein dichter Verschluss vorliegt. Somit sollte das SVV-Material trotz seines inhomogenen Aufbaus wässrige Lösungen grundsätzlich vom Ein- und Durchdringen abhalten können, wobei hinreichend determinierte Aussagen derzeit durch den komplexen Aufbau des Materials nicht möglich sind.

In allen Fällen des späteren Lösungszutritts sind allerdings die Relationen Lösungsdruck- Gebirgs- bzw. Kompaktionsdruck-Sekundärporosität (Biot-Koeffizient) zu beachten.

### **6.3 Simulationsablauf**

Die rechnerischen Simulationen sind vom Ablauf her so gestaltet, dass zunächst einmalig und als Grundlage für weitere Variationsanalysen die ersten 5 Jahre mit Auffahrung von Strecke und Bohrloch und den jeweilig anschließenden Standzeiten berechnet werden (s. Tab. 6.1). Bis zu diesem Zeitpunkt (direkt vor der Verfüllung des Bohrlochs) sind damit alle Berechnungsabläufe identisch und die abgespeicherten Berechnungsdaten dienen somit als Ausgangspunkt für alle weiteren Berechnungen zum Tragverhalten des Bohrlochverschlusses.

Bis zur Verfüllung des Bohrlochs laufen die Simulationen wie folgt ab:

- Initialisierung (Konfiguration von FLAC3D, Definition von Konstanten),
- Generierung des geometrischen Modells,
- Überprüfung des Modellvolumens durch Vergleich des theoretischen Volumens des gesamten Modells mit dem Volumen der aufaddierten Einzelvolumina der einzelnen Zonen,
- Zuweisung des Stoffmodells Hooke mit den Materialparametern für Steinsalz zu allen Zonen,
- Initialisierung der durch das Eigengewicht verursachten Spannungen,
- Sperrung der Deformationsmöglichkeiten des Modells an den Berandungsflächen (= Randflächen des Modells),
- Aufbringen der zusätzlichen Belastung durch den nicht mitmodellierten Gebirgsbereich über dem Modell,
- grafische Ausgabe der in das Modell eingebrachten Spannungen zur Überprüfung (Abb. 6.2),
- elastische Ausbalancierung des Modells und Zwischenspeicherung der Ergebnisse,
- Ausbruch der Strecke mit Zuweisung des Stoffmodells „Null“ (Materielose Zonen) zu den entsprechenden Zonen innerhalb des Ausbruchquerschnitts,
- elastische Ausbalancierung, Zwischenspeicherung der Ergebnisse und Erzeugung mehrerer grafischer Ausgabedateien zur Überprüfung (z. B. Abb. 6.3 und Abb. 6.4),
- Einlesen der \*.dll-Datei des Stoffmodells HOU/LUX (enthält auch das Stoffmodell Korthaus/Hein) und Zuweisung der Materialparameter für den Steinsalzhomogenbereich (Tab. 8.3),
- Definition einer Subroutine für die Berechnung der zeitabhängigen Ausgabedaten,
- Festlegung der Randbedingungen für die Kriechberechnung wie z. B. die Zeitschrittgröße und -steuerung,
- zeitabhängige Berechnung der Spannungen und Verformungen bis zum Ausbruch des Bohrloches nach 3 Jahren,
- Ausbruch des Bohrlochs mit Zuweisung des Stoffmodells „Null“ (materielose Zonen) zu den entsprechenden Zonen innerhalb des Bohrlochbereiches,

- elastische Ausbalancierung und Zwischenspeicherung der Ergebnisse,
- Fortsetzung der zeitabhängigen Berechnung der Spannungen und Verformungen um weitere 2 Jahre bis zur Verfüllung des Bohrloches 5 Jahre nach der Auffahrung der Strecke,
- Initialisierung des Kristallisationsdruckes bei aufgesättigtem SVV als Versatzmaterial,
- Abspeichern der History-Daten (zeitabhängige Ausgabedaten),
- Verfüllung des Bohrlochs dadurch, dass den deaktivierten Zonen innerhalb des Bohrlochs das den jeweils untersuchten Versatztyp zugehörige Stoffmodell zugewiesen wird, und zwar:
  - Stoffmodell Korthaus/Hein für Salzgrus und angemischten SVV,
  - Stoffmodell Hooke für aufgesättigten SVV,
- elastische Ausbalancierung und Zwischenspeicherung der Ergebnisse,
- Fortsetzung der zeitabhängigen Berechnung der Spannungen und Verformungen um weitere 5 Jahre bis zur Verfüllung der Strecke 10 Jahre nach der Auffahrung,
- Verfüllung der Strecke mit Zuweisung von Stoffmodell/Stoffmodellparametern Korthaus/Hein zu den entsprechenden Zonen innerhalb des Streckenquerschnitts,
- elastische Ausbalancierung und Zwischenspeicherung der Ergebnisse,
- Fortsetzung der zeitabhängigen Berechnung der Spannungen und Verformungen um weitere 90 Jahre bis insgesamt 100 Jahre nach der Auffahrung, wobei bei 20, 30, 50, 75 und 100 Jahren jeweils eine Zwischenspeicherung der Ergebnisse erfolgt und
- Abspeichern der History-Daten (zeitabhängige Ausgabedaten).

## **6.4 Auswertung der numerischen Simulationen**

### **6.4.1 Simulationsergebnisse bis zum Zeitpunkt der Anordnung des Bohrlochverschlusses**

Ausgehend davon, dass bis zum Verschluss des Bohrlochs kein Lösungszutritt erfolgt, beginnen alle simulierten Szenarien mit demselben Anfangszustand: Die Strecke wur-

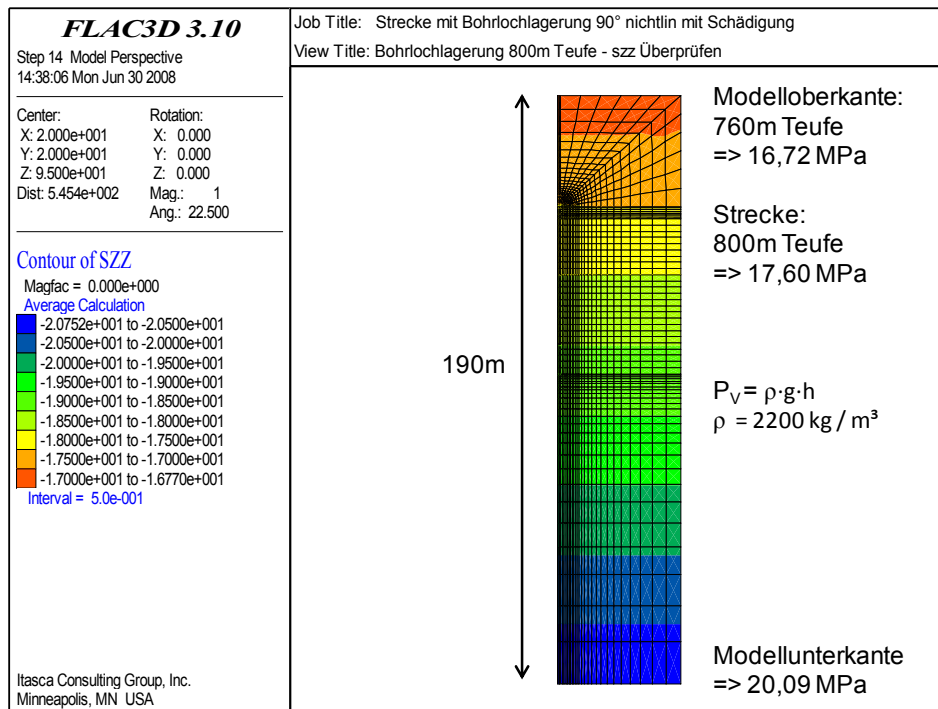
de vor 5 Jahren aufgefahren, das Bohrloch vor 2 Jahren. Zunächst bis zu diesem Zeitpunkt sollen im Folgenden die Ergebnisse der rechnerischen Simulation betrachtet und diskutiert werden.

Als erster Schritt der numerischen Simulation wird das Modell mit der entsprechenden Belastung zur Einprägung des primären Gebirgszustandes beaufschlagt und elastisch ausbalanciert. Die Strecke und das Bohrloch sind bisher noch nicht ausgebrochen. Nach der Ausbalancierung werden die numerisch berechneten Primärspannungen mit den vorgegebenen Zahlenwerten verglichen. Bei einer konstanten Gesteinsdichte von  $\rho = 2.200 \text{ kg/m}^3$  ergeben sich Primärspannungen an der Oberkante des Modells von  $P_G = 16,72 \text{ MPa}$  und an der Unterkante von  $P_G = 20,09 \text{ MPa}$ . Diese Zahlenwerte stimmen gut mit den von FLAC3D berechneten Primärspannungen überein (Abb. 6.2). Die geringfügigen Abweichungen kommen dadurch zustande, dass die in Abb. 6.2 dargestellten Spannungen über die Zonen gemittelt sind und so nicht die Modellkanten, sondern die Mittelpunkte der äußeren Zonen des Berechnungsmodells als Referenzpunkte dienen.

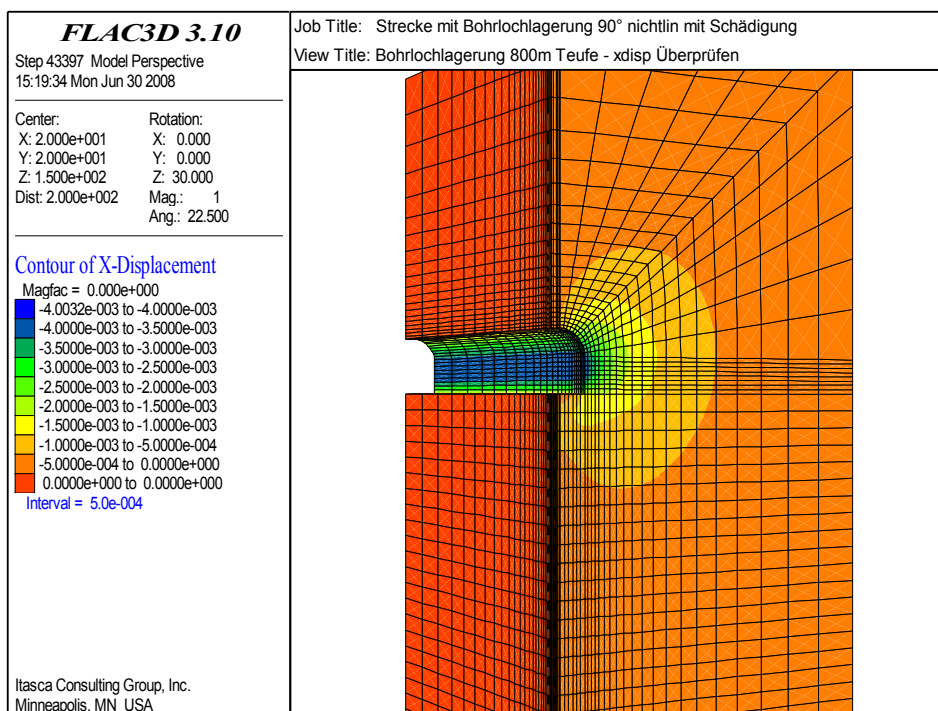
Im zweiten Schritt der Simulation wird die Strecke ausgebrochen. Eine direkte analytische Überprüfung der Simulationsergebnisse ist aufgrund der Streckengeometrie nicht möglich. Daher werden die Ergebnisse qualitativ und anhand von Randbedingungen überprüft.

Ein Kriterium hierfür ist die Verschiebung der einzelnen Zonen bzw. Gitterpunkte, die tangential zur Hohlraumkontur in den Hohlraum hinein erfolgen sollte. Für die Verschiebung in x-Richtung folgt daraus, dass sie im Bereich der Ulme maximal sein sollte und am First und in der Sohle gegen den Wert Null streben sollte. Die Simulation zeigt dieses Resultat (Abb. 6.3). Die Verschiebung in z-Richtung führt analog zu einer Sohlenhebung und einer Firstsenkung, ebenfalls ersichtlich in den berechneten Verschiebungen (Abb. 6.4).





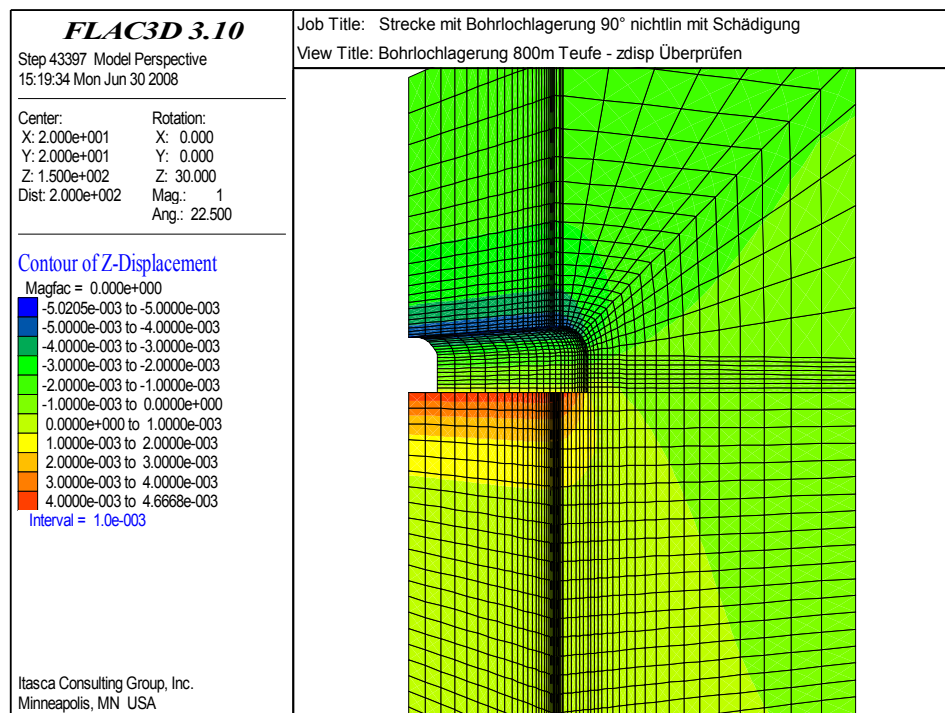
**Abb. 6.2** Primärspannungszustand



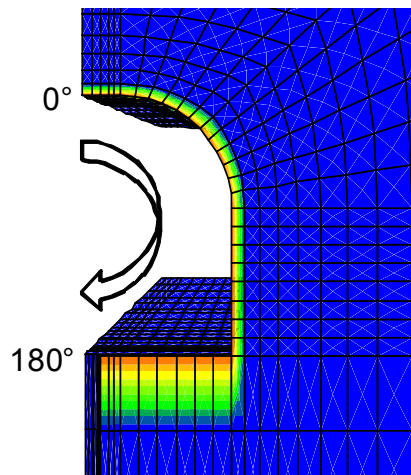
**Abb. 6.3** Verschiebungen in x-Richtung

Die weitere Analyse der Berechnungsergebnisse wird anhand von Schnitten entlang der Tunnelkontur vorgenommen. Hierbei werden die entsprechenden mechanischen

Größen wie z. B. Spannungen oder Verschiebungen über den Umfangswinkel aufgetragen (Abb. 6.5).



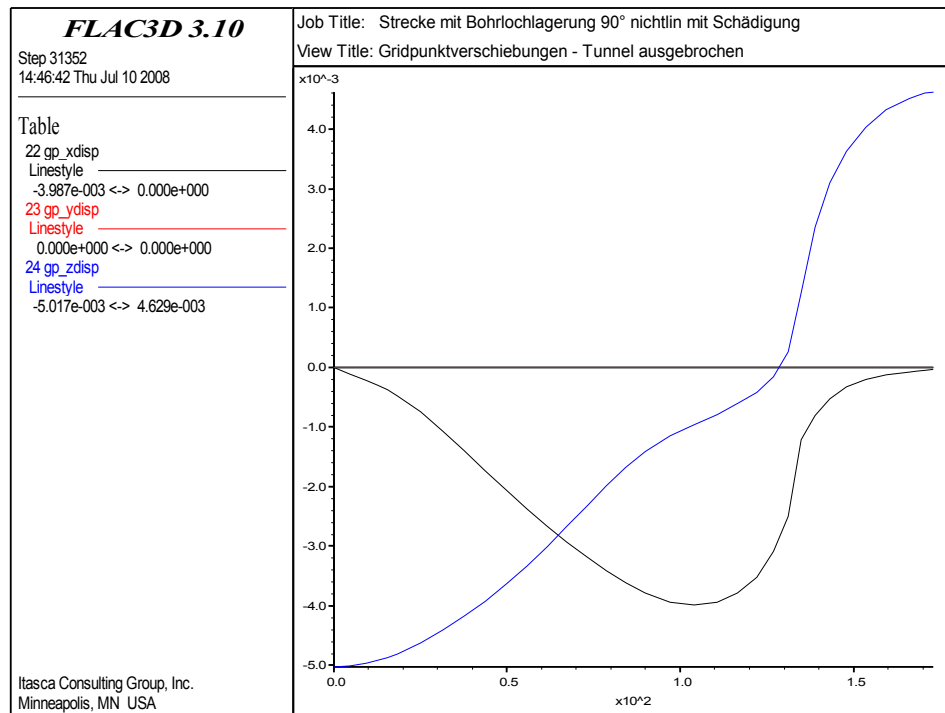
**Abb. 6.4** Verschiebungen in z-Richtung



**Abb. 6.5** Verlauf des Konturschnittes von 0° bis 180°

In Abb. 6.6 sind die Gitterpunktverschiebungen in Richtung der drei Koordinatenachsen entlang der Kontur aufgetragen. Die Verschiebungen in y-Richtung (parallel zum Verlauf der Streckenachse) sind erwartungsgemäß auch entlang der Kontur identisch

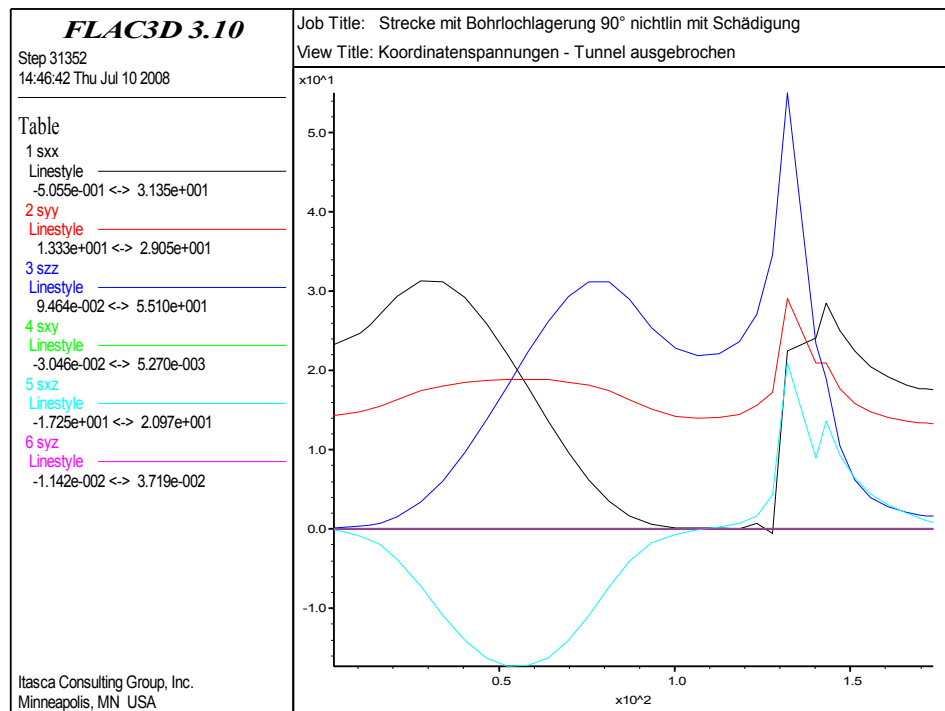
Null. Der Kurvenverlauf der Gitterpunktverschiebung in z-Richtung beginnt bei  $\varphi = 0^\circ$  im Negativen entsprechend der Firstsetzung, durchläuft an der Ulme den Nullpunkt, da sich die Teufenlage der Strecke nicht verändert und endet mit der Sohlhebung im Positiven bei  $\varphi = 180^\circ$ . Die Verschiebung entlang der x-Achse ist durch die Randbedingung bei  $\varphi = 0^\circ$  identisch Null, erreicht bei  $\varphi = 105^\circ$  an der Ulme einen Extremwert und geht anschließend an der Sohle wieder auf identisch Null zurück.



**Abb. 6.6** Verlauf der Gitterpunktverschiebungen entlang der Streckenkontur

Die berechneten Koordinatenspannungen sind in Abb. 6.7 dargestellt. Am First bei  $\varphi = 0^\circ$  ist die Spannung in z-Richtung Null bzw. nahe Null und die Spannung in x-Richtung relativ groß.

Die beiden Maxima der x-Spannung sind bedingt durch die Form der Strecke mit einer horizontalen Sohle und einem 2 m breiten horizontalen Firstbereich nicht genau an Firste ( $\varphi = 0^\circ$ ) und Sohle ( $\varphi = 180^\circ$ ), sondern in Richtung Ulme verschoben lokalisiert ( $\varphi = 30^\circ$  bzw.  $\varphi = 140^\circ$ ). An der Streckenecke bei ca.  $\varphi = 140^\circ$  werden große Spannungsspitzen erhalten, begründet durch den geringen Krümmungsradius des Eckbereiches. Diese Spannungsspitzen sind jedoch lokal auf den Eckbereich begrenzt und wirken sich nicht auf den weiteren Verlauf der Spannungen aus.



Anmerk.: Die grüne Linie wird verdeckt von violetten der Linie

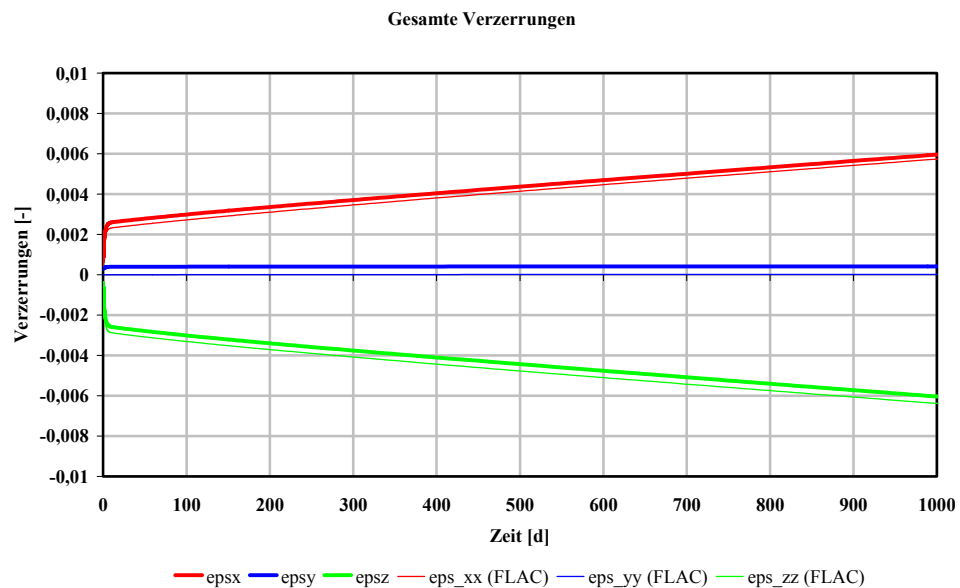
**Abb. 6.7** Verlauf der Koordinatenspannungen entlang der Streckenkontur

Ohne Berücksichtigung der Spannungsspitzen im Eckbereich liegt das Maximum der Spannungen in x- und z-Richtung etwa bei  $\max \sigma = 32 \text{ MPa}$ . Dieser Zahlenwert stimmt recht gut mit den theoretisch zu erwartenden Tangentialspannungen bei einer kreisrunden Streckenkontur überein, die sich zu  $\sigma_r = 2 \cdot P_v = 2 \cdot 17,6 \text{ MPa} \approx 35,2 \text{ MPa}$  berechnen.

Damit sind die bisherigen Berechnungsergebnisse in guter Übereinstimmung mit den theoretisch zu erwartenden Ergebnissen. Randbedingungen werden in der Simulation richtig abgebildet, und auch quantitativ stimmen die Ergebnisse im Rahmen der Vergleichsmöglichkeiten mit den analytisch zu erwartenden Zahlenwerten überein.

Ergebnisse von Simulationen mit dem Stoffmodell HOU/LUX können nur in Einzelfällen anhand von Schnitten oder Flächenplots überprüft werden. Daher wurde die Überprüfung an Hand von ausgewählten einzelnen Zonen vorgenommen. Dabei sind die Spannungen und Verzerrungen der einzelnen Zonen während der Simulation fortlaufend als sogenannte history – Werte mitgeschrieben und zu ausgewählten Zeitpunkten abgespeichert worden. Ein Vergleich der von FLAC3D in Zone 1467 berechneten Verzerrungen mit den aus den Spannungen der Zone 1467 an einem idealen Würfel be-

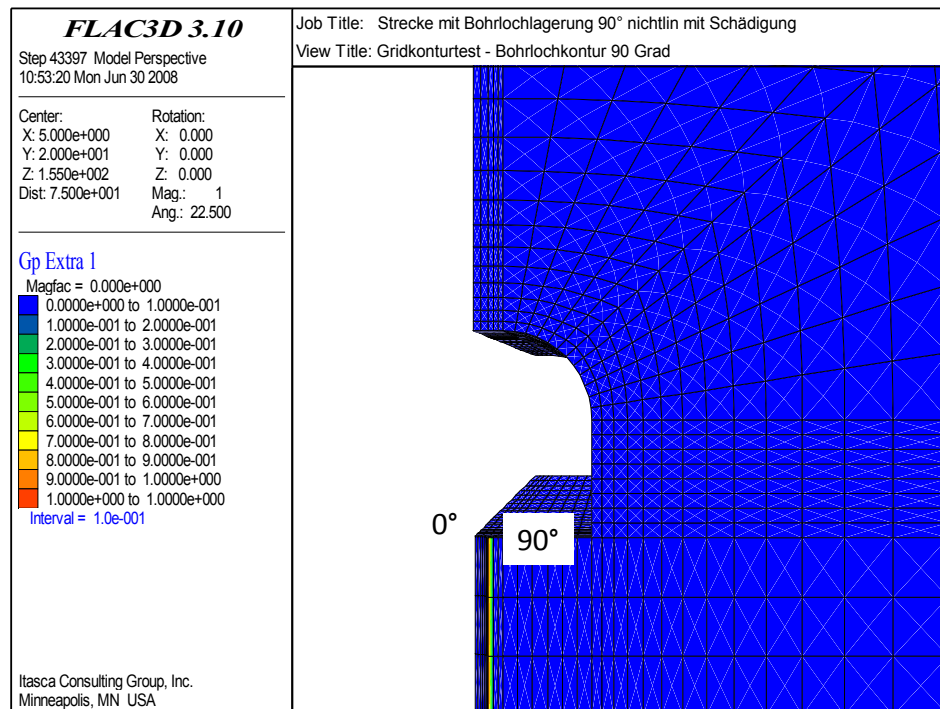
rechneten Verzerrungen zeigt eine gute Übereinstimmung (Abb. 6.8). Folglich kann davon ausgegangen werden, dass bei der Implementierung des Stoffmodells HOU/LUX und der Eingabe der zugehörigen Stoffmodellparameter keine Fehler unterlaufen sind. Ursache für die kleinen Abweichungen sind vermutlich die in der analytischen Berechnung nicht berücksichtigten Schubspannungen, die in der numerischen Berechnung mit FLAC3D in der Zone 1467 auftreten.



**Abb. 6.8** Verlauf der analytisch berechneten Verzerrungen eines idealen Würfels und der von FLAC3D berechneten Verzerrungen in Zone 1467 bei gleicher Beanspruchung

#### 6.4.2 Vorbemerkungen zu den folgenden Auswertungen

Zum Vergleich der Berechnungsergebnisse sind Daten entlang ausgewählter repräsentativer Schnitte ausgegeben und anschließend in Diagrammen vergleichend zusammengestellt worden. Als Schnitte in senkrechter Richtung sind dabei ein Schnitt in der Mitte des Bohrlochs (z-Koordinatenachse bzw. Symmetrieachse des Bohrlochs) durch den Versatz und zwei Schnitte im Steinsalzgebirge entlang der Bohrlochkontur erstellt worden (Abb. 6.9).



**Abb. 6.9** Lokalisation der Schnitte entlang der Bohrlochkontur in die Tiefe

Zusätzlich zu diesen drei Vertikalschnitten sind Horizontalschnitte in 1 m, 3 m, 5 m, 9 m, 11 m, 15 m, 21 m, 25 m, 29 m, 35 m und 41 m Tiefe von der Bohrlochkontur ins Gebirge entlang der y-Achse (0°) und x-Achse (90°) vorgenommen worden. Zwar sind alle Schnitte zur Auswertung der Berechnungsergebnisse herangezogen worden, doch werden im Folgenden zur Übersichtlichkeit der in den Auswertungen präsentieren Daten nicht alle vorgennannten Horizontal- bzw. Vertikalschnitte mit ihren Zustandsgrößenverläufen dargestellt, sondern nur einzelne ausgewählte Schnitte.

Entlang der oben vorgestellten Schnittlinien sind für die einzelnen Zonen bzw. Gitterpunkte jeweils die für die einzelnen Zustandsgrößen berechneten Werte aus den Ergebnisdateien in eine Auswertungsdatei ausgelesen worden. Eine zusammenfassende Übersicht zu den ausgelesenen Parametern wird in Tab. 6.2 gegeben:

Anmerkung: Der Parameter Schädigung ist nur im Stoffmodell HOU/LUX enthalten und ist deshalb bei den anderen Stoffmodellen HOOKE und KORTHAUS/HEIN automatisch Null. Die Dilatanz ist ebenfalls nur im Stoffmodell HOU/LUX enthalten; im Stoffmodell KORTHAUS/HEIN wird die Dilatanz durch die Porosität ersetzt und im Stoffmodell HOOKE ist sie wieder automatisch Null.

In der nachfolgenden Auswertung wird zunächst ausführlich der für das Steinsalzgebirge berechnete Zustand in der Umgebung des Bohrlochversatzes zusammen mit dem Tragverhalten der Verschlusskonstruktion bei Salzgrus als Versatzmaterial und einer Gebirgstemperatur von 22 °C diskutiert. Diese Diskussion dient als Ausgangsbasis für die weiteren Diskussionen bei erhöhten Gebirgstemperaturen von  $T = 40\text{ °C}$  bzw.  $T = 60\text{ °C}$  und bei anderen Verschlussmaterialien, in denen bevorzugt auf die Ergebnisunterschiede der verschiedenen Berechnungsvarianten eingegangen wird.

**Tab. 6.2** Auflistung der in den Schnitten dargestellten Zustandsgrößen

| Variable      | Beschreibung  | Einheit |
|---------------|---|---------|
| Nummer        | Nummerierung der ausgelesenen Zonen                             | [1]     |
| Teufe_BI      | Abszissenwert (Bohrlochteufe, x-Position, y-Position)           | [m]     |
| z_sxx         | Spannung in x-Richtung  | [MPa]   |
| z_syy         | Spannung in y-Richtung  | [MPa]   |
| z_szz         | Spannung in z-Richtung  | [MPa]   |
| z_sxy         | Schubspannung in xy-Richtung                                    | [MPa]   |
| z_sxz         | Schubspannung in xz-Richtung                                    | [MPa]   |
| z_syz         | Schubspannung in yz-Richtung                                    | [MPa]   |
| z_sig1        | 1. Hauptspannung  | [MPa]   |
| z_sig2        | 2. Hauptspannung  | [MPa]   |
| z_sig3        | 3. Hauptspannung  | [MPa]   |
| sig_von_Mises | Vergleichsspannung  | [MPa]   |
| eps_xx        | Verzerrung in x-Richtung  | [1]     |
| eps_yy        | Verzerrung in y-Richtung  | [1]     |
| eps_zz        | Verzerrung in z-Richtung  | [1]     |
| eps_xy        | Verzerrung in xy-Richtung                                       | [1]     |
| eps_yz        | Verzerrung in yz-Richtung                                       | [1]     |
| eps_xz        | Verzerrung in xz-Richtung                                       | [1]     |
| eps_1         | 1. Hauptverzerrung  | [1]     |
| eps_2         | 2. Hauptverzerrung  | [1]     |
| eps_3         | 3. Hauptverzerrung  | [1]     |
| eps_vm_k      | Vergleichsverzerrung, berechnet aus den Koordinatenverzerrungen | [1]     |
| eps_vm_h      | Vergleichsverzerrung, berechnet aus den Hauptverzerrungen       | [1]     |
| sig_r         | Spannung radial zum Bohrloch                                    | [MPa]   |
| sig_t         | Spannung tangential zum Bohrloch                                | [MPa]   |
| sig_z         | Spannung parallel zum Bohrloch                                  | [MPa]   |
| eps_r         | Verzerrung radial zum Bohrloch                                  | [1]     |

Tab. 6.2 Auflistung der in den Schnitten dargestellten Zustandsgrößen  
(Fortsetzung)

| Variable      | Beschreibung   | Einheit |
|---------------|--|---------|
| eps_t         | Verzerrung tangential zum Bohrloch                     | [1]     |
| eps_z         | Verzerrung parallel zum Bohrloch                       | [1]     |
| z_teufe       | Teufe bezogen auf die Streckensohle                    | [m]     |
| x_disp        | Gitterpunktverschiebung in x-Richtung                  | [m]     |
| y_disp        | Gitterpunktverschiebung in y-Richtung                  | [m]     |
| z_disp        | Gitterpunktverschiebung in z-Richtung                  | [m]     |
| x_pos         | x-Position des Zonenmittelpunktes                      | [m]     |
| y_pos         | y-Position des Zonenmittelpunktes                      | [m]     |
| z_pos         | z-Position des Zonenmittelpunktes                      | [m]     |
| Schaedigung   | Schädigung   | [1]     |
| Dil_PI_Gesamt | Dilatanz im Steinsalzgebirge bzw. Porosität im Versatz | [1]     |

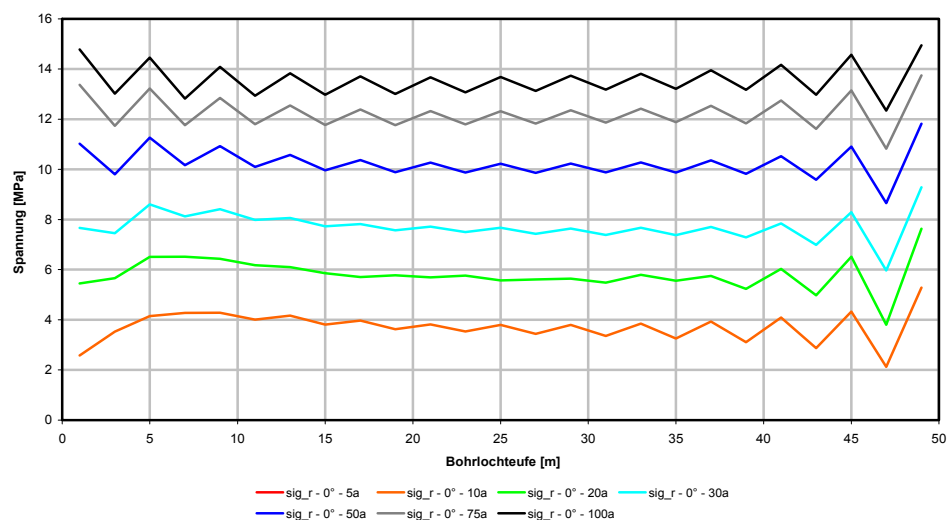
#### 6.4.3 Salzgrus als Verschlussmaterial

Die ersten Berechnungsergebnisse haben gezeigt, dass sowohl der Salzgrus im Bohrloch wie auch der Salzgrus in der Strecke nach ihrem Einbau im Lauf der Zeit eine nur sehr geringe Porositätsänderung erfahren, obwohl eine Umlagerung von Spannungen vom umgebenden Salinalggebirge in den Salzgrus erfolgt ist. Unstimmigkeiten in den Stoffmodellparametern oder den Stoffmodellen konnten nicht identifiziert werden. Die maximalen unbalancierten Kräfte mit  $F_{\text{maxunbal}} < 0,1$  haben es zudem nahegelegt, dass auch die Zeitschritte hinreichend klein und ihre Steuerung in dem Iterationsprozess ausreichend genau durchgeführt wurde. Nach Ausschluss dieser möglichen Fehler ist dann als Ursache für die wenig plausiblen Berechnungsergebnisse der gewählte Ablauf der Berechnung identifiziert worden. Dabei handelt es sich um einen Berechnungsteil, der mit der Art des numerischen Verfahrens der finiten Differenzen unmittelbar verbunden ist: Jeweils nach der Verfüllung des Bohrlochs und der Verfüllung der Strecke wurde das Modell instantan elastisch ausbalanciert, um danach mit einem möglichst gut ausbalancierten Modell mit möglichst großen Zeitschritten in die zeitabhängigen Berechnungen eintreten zu können. Im Zuge dieser Ausbalancierung ist jedoch bereits der Großteil der deviatorischen Beanspruchungen aus dem Gebirge in den Versatz umgelagert worden, ohne dass eine (zeitabhängige) Kompaktion stattfinden konnte. Im weiteren Verlauf konnten damit durch Kriechverformungen nur noch deutlich reduzierte Beanspruchungen in den Versatz umgelagert werden, wodurch die

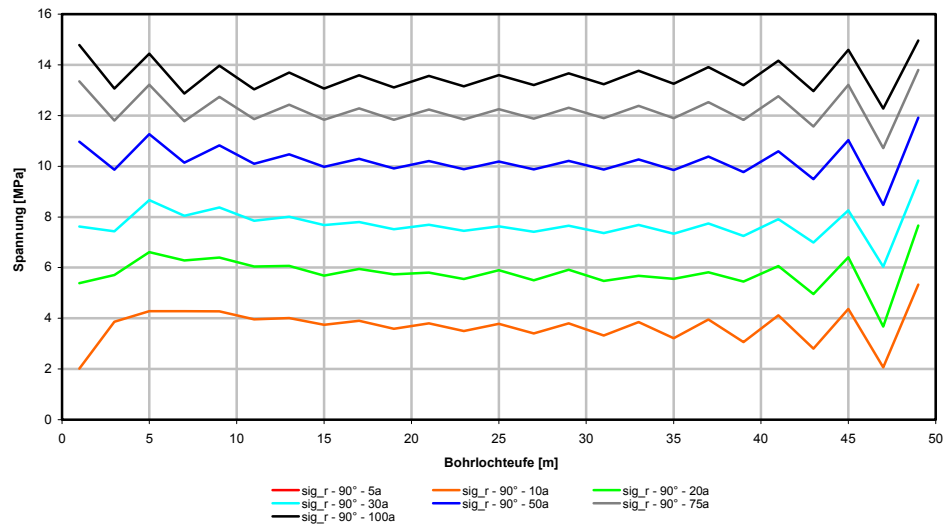


Kompaktion und damit die Porositätsverringering entsprechend gering ausgefallen sind. Um auch in der rechnerischen Simulation realitätsnahe Kompaktionsverformungen zu erhalten, wurde der Berechnungsablauf dahingehend abgeändert, dass auf das Ausbalancieren nach Einbringung des Salzgruses in das Bohrloch und in die Strecke verzichtet wurde.

Zum Zeitpunkt der Verfüllung des Bohrlochs nach 5 Jahren befindet sich somit der Versatz in einem als locker gelagert zu charakterisierenden Zustand im Bohrloch und die Radialspannungen in den Konturzonen sind dementsprechend zu diesem Zeitpunkt Null (Abb. 6.10 und Abb. 6.11). Ab diesem Zeitpunkt baut sich bedingt durch Kriechdeformationen des umgebenden Steinsalzgebirges ein Radialdruck auf, der innerhalb von 95 Jahren bis auf etwa 14 MPa ansteigt. Ein Vergleich der Radialspannungen im Konturbereich bei  $\alpha = 0^\circ$  (Abb. 6.10) mit den Radialspannungen im Konturbereich bei  $\alpha=90^\circ$  (Abb. 6.12) zeigt zudem, dass sich die Radialspannungen in x- und y-Richtung bis auf den obersten Teil nach 10 Jahren identisch aufbauen. Die rechnerische Simulation kann folglich abbilden, dass der Salzgrus als zunächst locker gelagertes Haufwerk mit einem Anfangsporenanteil von  $\Phi = 31\%$  durch die Kriechverformungen des Steinsalzgebirges kompaktiert wird und sich somit innerhalb des Versatzes horizontal ein homogener Kompaktionsdruck aufbaut. In der Teufenrichtung ist der Radialdruck entlang der Bohrlochkontur näherungsweise zu jedem Zeitpunkt konstant.

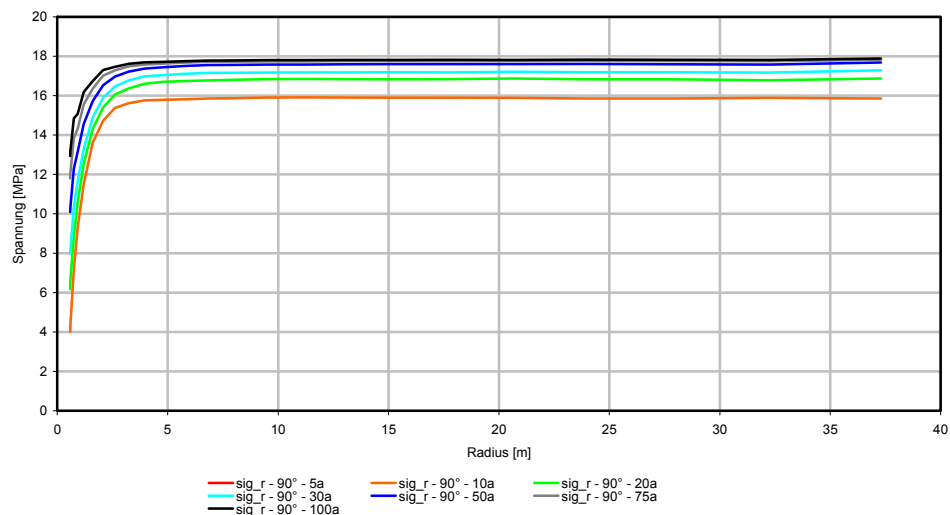


**Abb. 6.10** Radialspannungen in den Konturzonen bei  $\alpha = 0^\circ$  zu unterschiedlichen Zeitpunkten (Vertikalschnitt)



**Abb. 6.11** Berechnete Radialspannungen in den Konturzonen bei  $\alpha = 0^\circ$  zu unterschiedlichen Zeitpunkten (Vertikalschnitt)

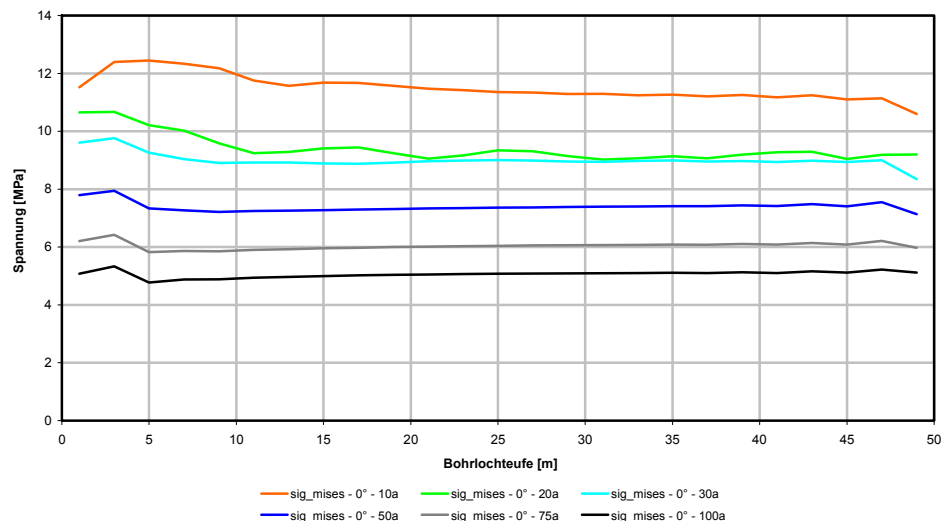
Anmerkung: Als Ursache für die periodisch erscheinenden Schwankungen der berechneten Zahlenwerte im Vertikalschnitt ist die relativ grobe Diskretisierung anzusehen. Eine größere Anzahl an Zonen würde voraussichtlich zwar die Schwankungen reduzieren, doch die mittleren Werte nicht verändern, weshalb auf eine genauere Berechnung bei drastisch vergrößerten Berechnungszeiten verzichtet wurde.



**Abb. 6.12** Radialspannungen in einem Horizontalschnitt in  $\alpha = 90^\circ$ -Richtung in einer Bohrlochteufe von 11 m

In horizontaler Richtung bauen sich die Spannungen radial und tangential bis in eine Entfernung von etwa 3 - 4 m Abstand von der Bohrlochachse auf und verlaufen anschließend näherungsweise konstant auf dem Niveau des primären Gebirgsdruckes. Unter der Strecke in 0°-Richtung verändern sich die Spannungen im Laufe der Zeit nur gering, während in 90°-Richtung bei geringen Bohrlochteufen ein Aufbau der Spannungen in radialer und in geringerem Ausmaße auch in tangentialer Richtung berechnet worden ist.

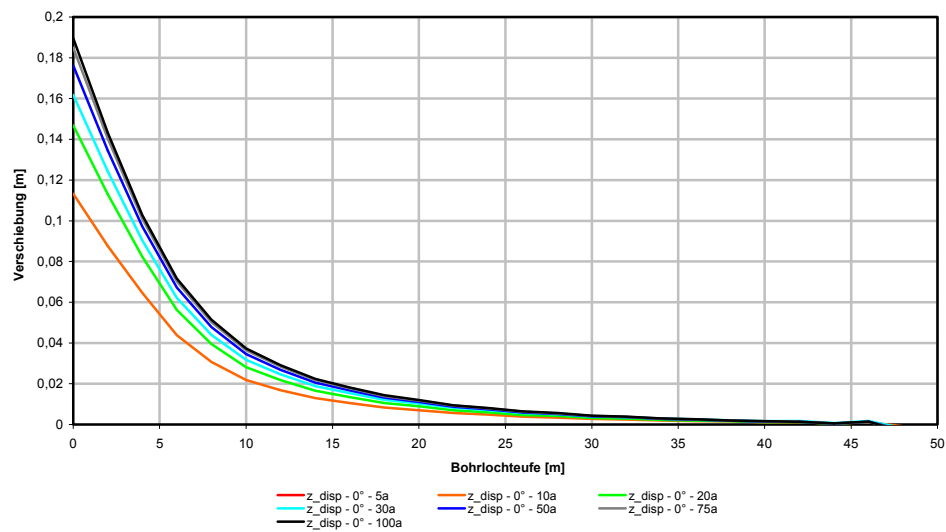
Für die Beurteilung der effektiv wirksamen Belastungen sind die in Abb. 6.13 dargestellten Deviatorspannungen von Bedeutung. Die Deviatorspannungen gehen im Lauf der Zeit von  $\sigma_D \approx 12$  MPa bis auf  $\sigma_D \approx 5$  MPa zurück und zudem gleichen sich die zu Beginn etwas höheren Deviatorspannungen in der Nähe der Streckensohle den Deviatorspannungen in größeren Bohrlochteufen an, so dass nach 100 Jahren Berechnungszeit eine fast konstante Deviatorspannung an der Kontur vorliegt.



**Abb. 6.13** Deviatorspannungen (Von Mises Spannungen) in den Konturzonen bei  $\alpha = 0^\circ$  zu unterschiedlichen Zeitpunkten (Vertikalschnitt)

Ein weiteres Kriterium für die Beurteilung der Interaktion Versatz-Steinsalzgebirge sind die berechneten Verschiebungen. In vertikaler Richtung wird bei  $z = 0$  m eine Sohlenhebung von ca.  $u_z \approx 11$  cm nach 10 Jahren bzw.  $u_z \approx 19$  cm nach 100 Jahren berechnet. Diese Verschiebungen in z-Richtung nehmen mit zunehmender Teufe hin ab und betragen in  $z = 40$  m Teufe noch weniger als  $u_z \approx 2$  mm (Abb. 6.14). In  $\alpha = 90^\circ$ -Richtung sind die Verschiebungen in z-Richtung nahezu identisch. In den ersten 20 m

resultieren aus den axialen Bohrlochverschiebungen (= Sohlenhebung) Verzerrungen von  $\varepsilon_z \approx 1 - 2 \%$  im Versatz.

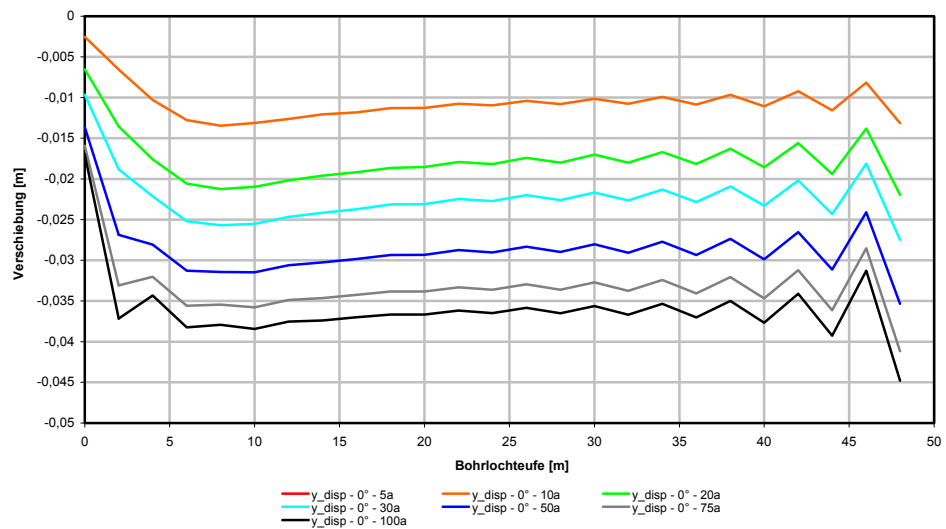


**Abb. 6.14** Verschiebungen in z-Richtung entlang der Bohrlochkontur bei  $\alpha = 0^\circ$

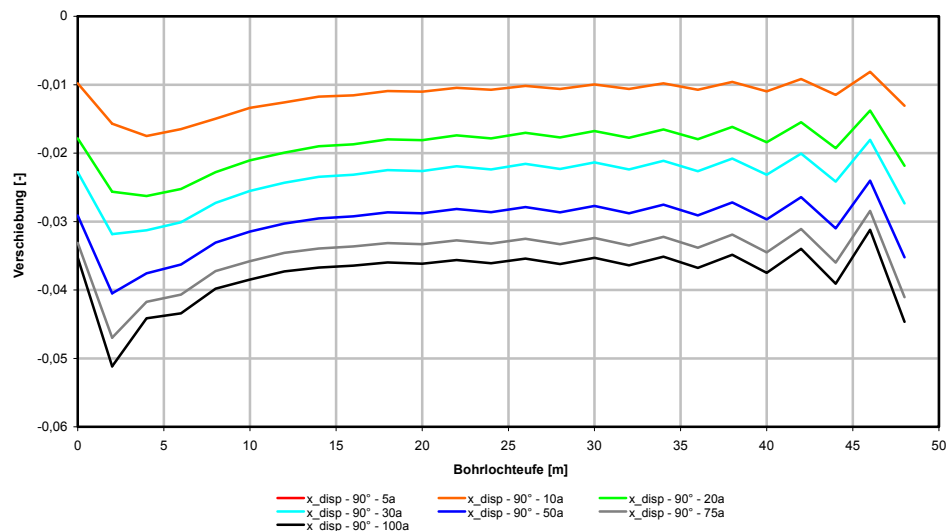
Die Verschiebungen in tangentialer Richtung (x-Richtung bei  $\alpha = 0^\circ$  bzw. y-Richtung bei  $\alpha = 90^\circ$ ) sind wie zu erwarten in beide Richtungen jeweils Null und belegen die Sperrungen in diese Richtungen. In radialer Richtung sind die Verschiebungen in beiden Fällen negativ und es folgt somit eine Verkleinerung des Bohrlochquerschnittes (Konvergenz). Abb. 6.15 und Abb. 6.16 zeigen, dass die Verschiebungen in radialer Richtung ab einer Bohrlochteufe von  $z \approx 10$  m einen etwa linear in geringem Maße mit der Teufe zunehmenden und auch etwa gleichen Verlauf in x- und y-Richtung aufweisen.

Bis zu einer Bohrlochteufe von  $z \approx 10$  m ist deutlich der Einfluss der Strecke auf das Spannungsfeld im Liegenden zu erkennen. Hieraus folgen geringere Verschiebungen in  $\alpha = 0^\circ$ -Richtung unterhalb der Strecke (in Streckenachsrichtung) und größere Verschiebungen unterhalb der Strecke in  $90^\circ$ -Richtung (senkrecht zur Streckenachsrichtung). Die Verschiebungen sind etwa 2 – 3m unterhalb der Streckensohle in Richtung senkrecht zur Streckenachse am größten. Diese Verschiebungen korrespondieren mit den erhöhten Lateralspannungen (Traggewölbe). Zusammenfassend kann somit an dieser Stelle festgehalten werden, dass die rechnerische Simulation auf das zu erwartende Tragverhalten des Tragsystems Strecke-Bohrloch führt, der Einfluss der Strecke im Liegenden bis etwa zu einer Teufe von 10 m unterhalb der Streckensohle reichend und ab einer Bohrlochteufe von ca. 10 m bei Salzgrus als Versatzmaterial der Einfluss

der Stecke auf das Bohrlochtragverhalten als nur noch gering angesehen werden kann.



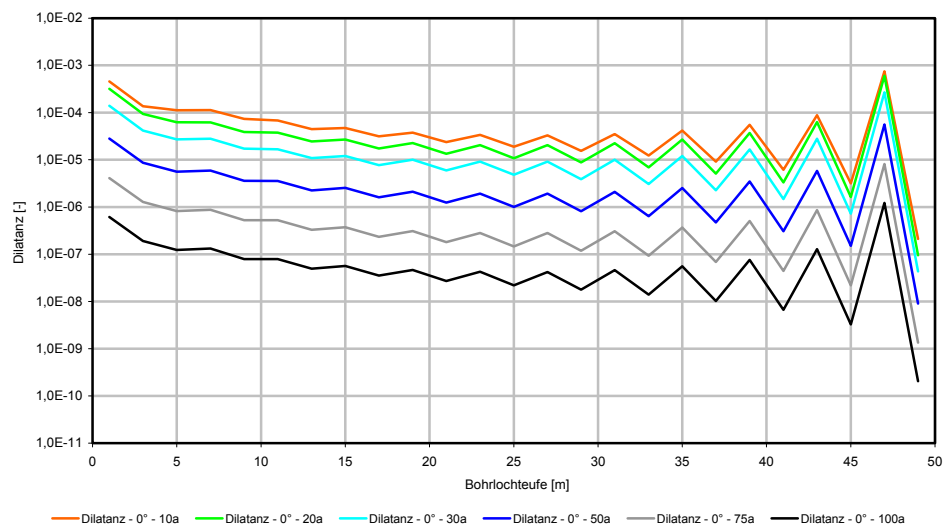
**Abb. 6.15** (Radialverschiebungen) Verschiebungen in y-Richtung entlang der Bohrlochkontur bei  $\alpha = 0^\circ$



**Abb. 6.16** (Radialverschiebungen) Verschiebungen in y-Richtung entlang der Bohrlochkontur bei  $\alpha = 90^\circ$

Neben den Gebirgsspannungen und Gebirgsverformungen ist ein wesentlicher Aspekt des Tragverhaltens die Ausdehnung und Intensität der Gebirgsentfestigung der Auflockerungszone, die sich im konturnahen Steinsalzgebirge entwickelt. Maßgeblich für die Charakterisierung der Intensität der Gebirgsentfestigung in der Auflockerungszone

ist die in Abb. 6.17 und Abb. 6.19 dargestellte Dilatanz des Gebirges. In den ersten Metern ist die Dilatanz in  $\alpha = 0^\circ$ - und  $\alpha = 90^\circ$ -Richtung bedingt durch den Einfluss der Strecke (Zugspannungen in der Streckensohle) relativ groß, nimmt jedoch mit der Bohrlochteufe dann deutlich ab (Darstellung halblogarithmisch). Der Einfluss der Strecke ist beim Vergleich der Dilatanz in x- und y-Richtung allerdings auch noch in größerer Teufe zu erkennen, da die Dilatanz in x-Richtung etwa um einen Faktor 5 größer ist als in y-Richtung. Ursächlich hierfür ist der Spannungszustand vor der Verfüllung des Bohrloches im Liegendgebirge, da die Spannungen in x-Richtung senkrecht zum Streckenverlauf deutlich größer sind als die Spannungen in y-Richtung parallel zum Streckenverlauf und so zu einer größeren Belastung der Bohrlochkontur in y-Richtung führen. Bestätigt wird dieser Einfluss durch den leichten Anstieg der Dilatanz bei  $\alpha = 90^\circ$ , da mit zunehmender Bohrlochteufe der Einfluss der Strecke abnimmt.



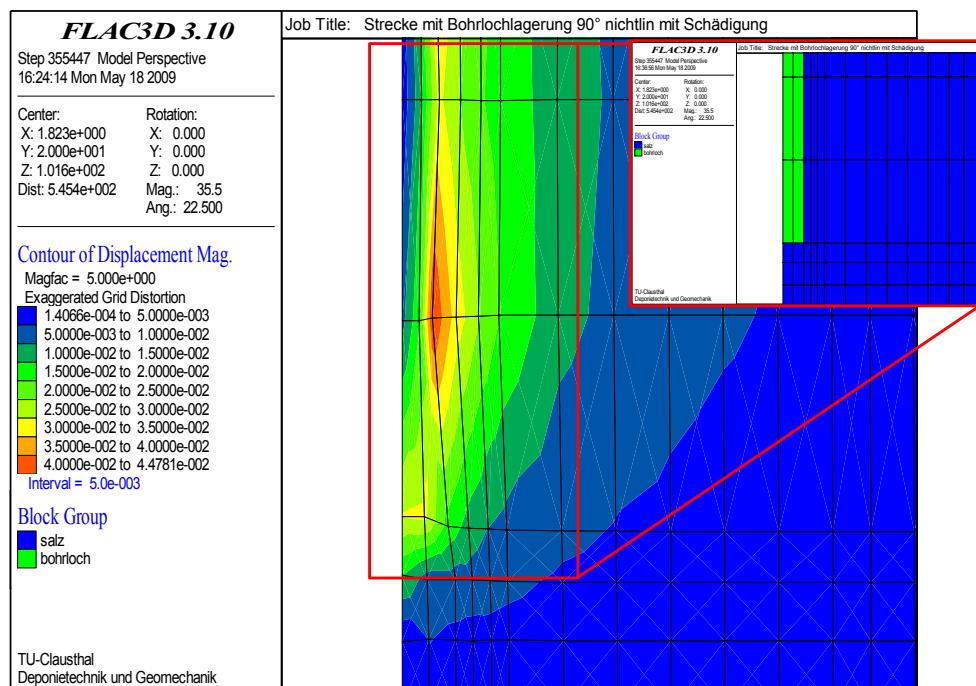
**Abb. 6.17** Dilatanz in den Konturzonen bei  $\alpha = 0^\circ$  (= Streckenachsrichtung)

Sowohl Abb. 6.17 wie auch Abb. 6.19 ist zu entnehmen, dass die Dilatanz in den Zonen der Bohrlochkontur in Streckennähe am größten ist und mit zunehmender Bohrlochteufe zurückgeht. Zu erkennen ist ebenfalls, dass die Dilatanz im Lauf der Jahre zurückgeht und somit eine Dilatanzrückbildung (Verheilung) in der Auflockerungszone einsetzt. Innerhalb der 100 Jahre Berechnungsdauer geht die Dilatanz um etwa drei Größenordnungen auf Zahlenwerte in der Größenordnung von  $\varepsilon_{Vol} < 10^{-7}$  zurück.

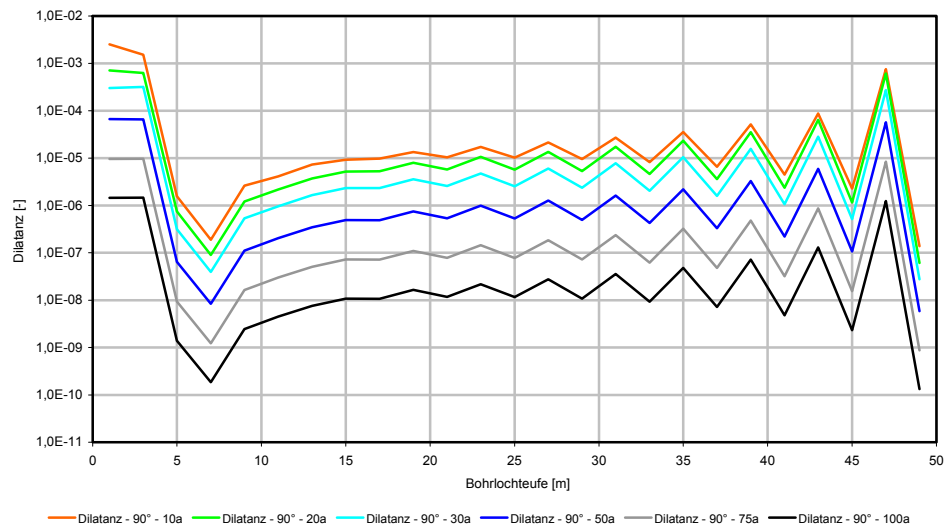
In horizontaler Richtung sind die Zahlenwerte der Dilatanz jeweils nur in den ersten beiden Zonen ungleich Null. Hieraus folgt eine radiale Ausdehnung der Dilatanzzone bis zu  $r \approx 0,5 - 0,6$  m und somit ein aufgelockerter Bereich von ca. 0,1 m um das

Bohrloch. Die größten Dilatanzen treten auch hierbei direkt unterhalb der Streckensohle in  $\alpha = 0^\circ$ -Richtung auf, Abb. 6.17.

Nicht beachtet in der Auswertung werden die starken Oszillationen der Dilatanz am Bohrlochende, da diese auf die Diskretisierung zurückzuführen sind. Die Zonen entlang der Kontur sind in radialer Richtung schmal und in axialer Richtung langgestreckt gewählt, um mit möglichst wenigen Zonen dennoch eine hinreichend feine Diskretisierung in radialer Richtung zu erhalten. Diese ungünstige geometrische Gestaltung der Zonen führt dazu, dass die Oszillationen, die durch die grobe Diskretisierung des Bohrlochsendes in den Zustandsgrößen entstehen, nur langsam abgebaut werden. Ursache dieser Schwankungen ist die Ecke des Bohrlochs, da in diesem Bereich analog zur Ecke in der Strecke Verschiebungs- bzw. Spannungsspitzen entstehen. Da die Mittelwerte der Zustandsgrößenverläufe hiervon nicht betroffen sind, ist auf eine Wiederholung der Berechnungen mit feinerer Diskretisierung und folglich längeren Berechnungszeiten verzichtet worden.



**Abb. 6.18** Verschiebungen in der x-z-Ebene in der Umgebung der Bohrlochecke (zur Verdeutlichung sind die Verformungen der Zonen in der Darstellung um den Faktor 5 erhöht)



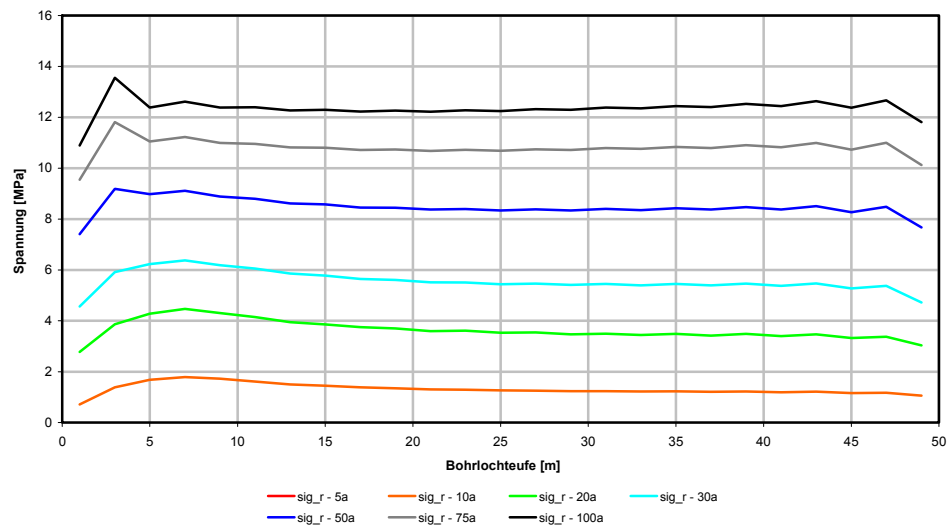
**Abb. 6.19** Dilatanz in den Konturzonen bei  $\alpha = 90^\circ$  (senkrecht zur Streckenachsrichtung)

Anmerkung: Die starken Oszillationen der Dilatanz im Bohrlochtiefsten sind eine Folge einer relativ groben Diskretisierung des Bohrlochendbereiches, da sich hier wie im seitlichen Streckensohlbereich eine nicht abgerundete Ecke befindet.

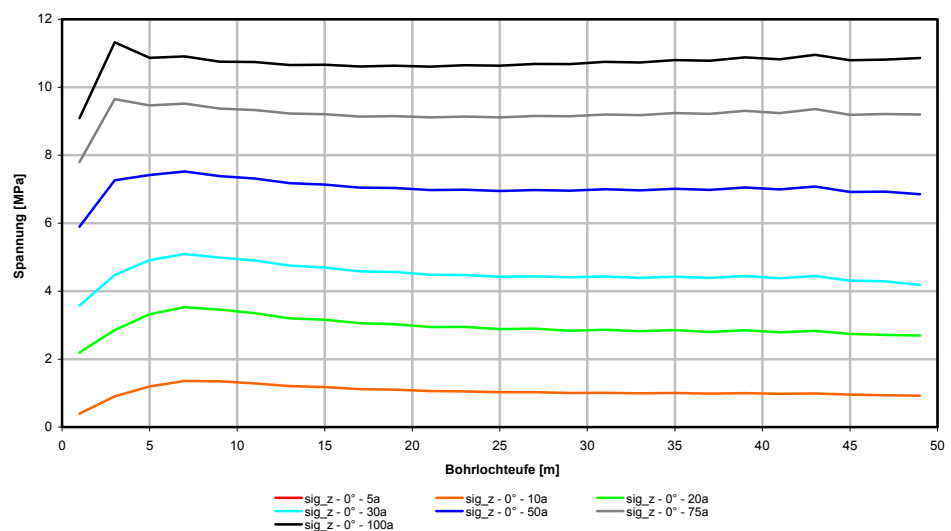
Die berechneten Schädigungen  $D$  liegen etwa in der gleichen Größenordnung wie die berechneten Dilatanzen.

Neben dem Verhalten des das Bohrloch umgebenden Steinsalzgebirges bzw. der Reaktion des Steinsalzgebirges auf den eingebrachten Versatz sind das Verhalten und der mechanische Zustand des Versatzes von besonderem Interesse. Bei der Betrachtung der Spannungen in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs zeigt sich entsprechend Abb. 6.20, dass Radial- und Tangentialspannung erwartungsgemäß fast deckungsgleiche Verläufe haben und vom Niveau her etwa  $\Delta\sigma \approx 1 \text{ MPa}$  unter den Spannungen in den Konturzonen liegen. Ursächlich hierfür ist vermutlich, dass die Spannungen für die Konturzonenmittelpunkte berechnet wurden und so etwas größer sind als die Spannungen direkt an der Kontur.



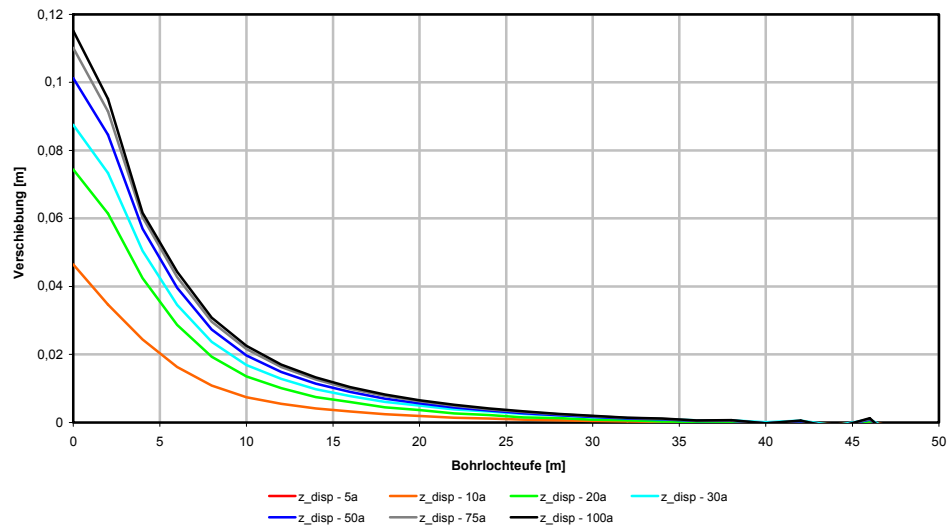


**Abb. 6.20** Radialspannungen im Versatzmaterial in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs



**Abb. 6.21** Axialspannungen im Versatzmaterial in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs

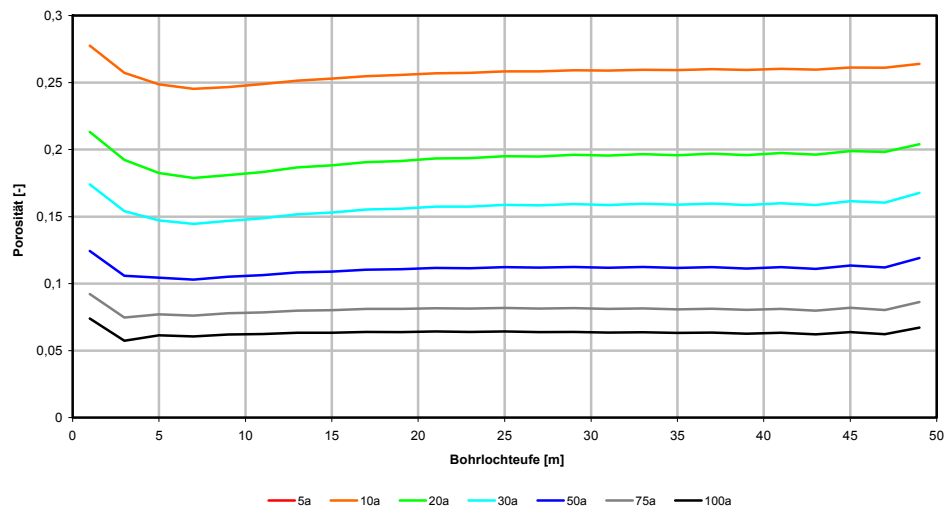
In z-Richtung sind die Spannungen im Versatz etwa um  $\Delta\sigma \approx 2$  MPa niedriger als in radialer- bzw. tangentialer Richtung. Ursache hierfür ist vermutlich, dass die Verschiebungen in z-Richtung im Versatz (Abb. 6.22) geringer sind, als die Verschiebungen an der Bohrlochkontur und somit der Bohrlochverschluss in axialer Richtung einer Dehnung unterliegt.



**Abb. 6.22** Verschiebungen in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs in z-Richtung

Maßgebend für die Durchlässigkeit des Versatzmaterials (hier: Salzgrus) ist das Porenvolumen bzw. die Porosität. Die berechneten Porositäten zeigen, dass die anfänglich relativ große Porosität von  $\eta_0 = 31\%$  innerhalb von 30 Jahren annähernd halbiert wird und nach 100 Jahren bis auf  $\eta = 6 - 7\%$  zurückgeht (Abb. 6.23). Dabei wird die größte Kompaktion einige Meter unterhalb der Streckensohle und damit dort beobachtet, wo die Gebirgsbeanspruchung am größten ist und die Spannungsumlagerungen demzufolge auch am intensivsten ausgeprägt sind.

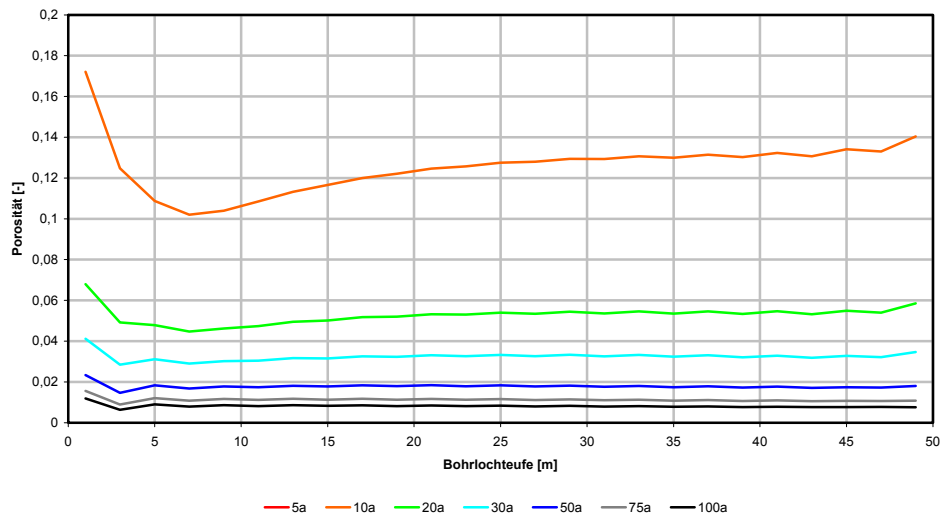
Wird angenommen, dass durch die abgelagerten Abfälle eine Wärmeentwicklung erfolgt, dann resultiert daraus eine Zunahme der Temperatur des umgebenen Steinsalzgebirges. Aus diesem Grund sind auch Berechnungen bei einer erhöhten und vereinfacht als konstant angenommenen Gebirgstemperatur von  $T = 40^\circ$  und von  $T = 60^\circ$  durchgeführt worden. Es zeigt sich dabei erwartungsgemäß, dass eine erhöhte Gebirgstemperatur dazu führt, dass sich aufgrund der dadurch erhöhten Kriechraten die Spannungen im Versatzmaterial und in den Konturzonen schneller aufbauen und zum Teil auch höhere Endwerte erreicht werden, wie z. B. zu ersehen bei den Radialspannungen in den Zonen entlang der Bohrlochkontur in  $\alpha = 90^\circ$ -Richtung, wo der bei einer Gebirgstemperatur von  $T = 22^\circ\text{C}$  nach 100 Jahren erreichte Endwert von  $\sigma_r \approx 14\text{ MPa}$  bei einer Gebirgstemperatur von  $T = 60^\circ\text{C}$  bereits nach 20 Jahren erreicht wird und nach 100 Jahren die Radialspannung auf einen Zahlenwert von  $\sigma_r \approx 18\text{ MPa}$  angestiegen ist.



**Abb. 6.23** Porosität des Versatzes in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs

Die Verschiebungen in radialer Richtung entwickeln sich zeitlich bei  $T = 60\text{ °C}$  schneller, erreichen jedoch nur etwa um 1 cm größere Endwerte als bei  $T = 22\text{ °C}$ . In axialer Richtung dagegen ist die Verschiebung im Bereich der Streckensohle (Sohlhebung) mit  $u_z \approx 40\text{ cm}$  mehr als doppelt so groß wie bei  $T = 22\text{ °C}$  Gebirgstemperatur. Somit werden die axialen Verzerrungen im Bohrlochversatz in Axialrichtung des Bohrlochs etwa doppelt so groß wie bei  $T = 22\text{ °C}$  Gebirgstemperatur. Die größeren Verzerrungen in Axialrichtung des Bohrlochs wirken sich jedoch nur in einem geringen Maße auf die Spannungen in Axialrichtung aus, da im Stoffmodell KORTHAUS/HEIN die Temperatur berücksichtigt wird und der Versatz sich durch die erhöhte Temperatur viskoser verhält und die Belastungen besser umlagert.

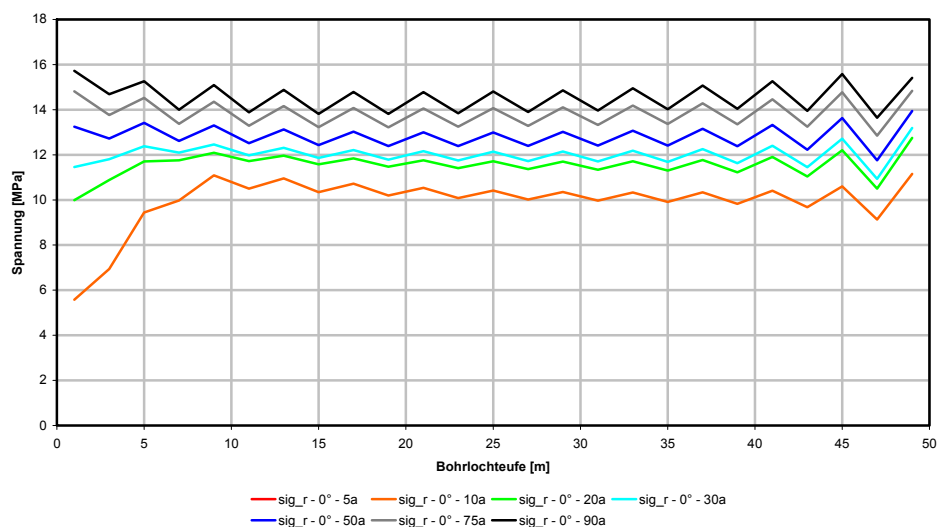
Signifikante Unterschiede zeigen sich in der Entwicklung der Porosität, Abb. 6.24. Nach 10 Jahren hat sich die Porosität bereits auf  $\eta = 10 - 13\%$  reduziert und nach 20 Jahren liegt sie bereits unter dem Zahlenwert, der für eine Gebirgstemperatur von  $T = 20\text{ °C}$  nach 100 Jahren erhalten wird. Nach 100 Jahren wird ein durchschnittlicher Zahlenwert von  $\eta = 0,8\%$  erreicht. Damit kann davon ausgegangen werden, dass das Versatzmaterial Salzgrus nahezu vollständig rekompaktiert ist und die mechanische und auch hydraulische Qualität von Steinsalz erreicht hat.



**Abb. 6.24** Porosität des Versatzes in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs bei einer erhöhten Gebirgstemperatur von  $T = 60\text{ }^{\circ}\text{C}$

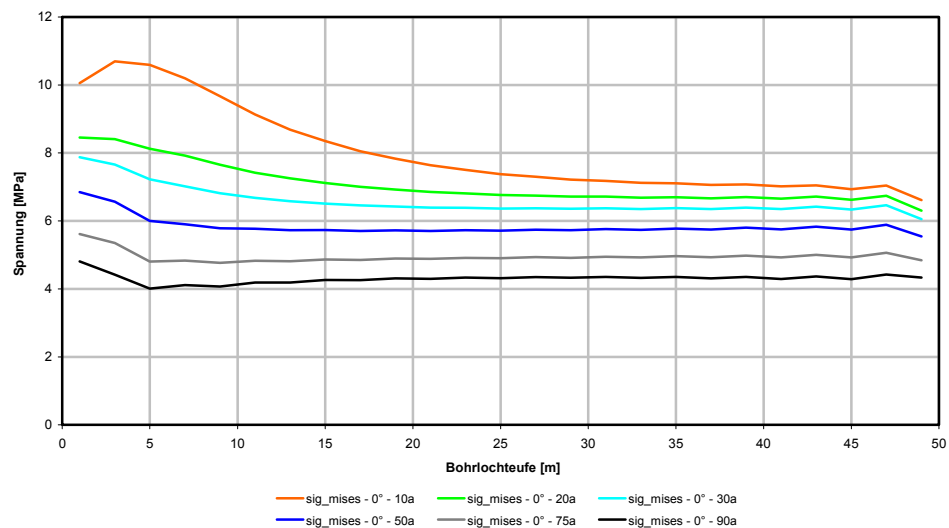
#### 6.4.4 Angemischter SVV als Verschlussmaterial

Im Vergleich zu Salzgrus ist der angemischte SVV entsprechend den Befunden aus den Laboruntersuchungen zwar auch ein kompaktionsfähiges, aber gegenüber Salzgrus doch deutlich steiferes Material. Diese veränderte Materialeigenschaft zeigt sich auch in den Berechnungsergebnissen, da sich die Kontaktspannungen an der Kontur deutlich schneller aufbauen und darüber hinaus etwas größere Endwerte erreichen als bei Salzgrus (Abb. 6.25). Qualitativ ist der räumliche und zeitliche Verlauf der Spannungskomponenten identisch zu Salzgrus.



**Abb. 6.25** Radialspannungen in den Konturzonen in  $\alpha = 90^{\circ}$ -Richtung

Der stetigkeitsbedingt schnellere Aufbau der Radialspannungen bei angemischtem SVV hat zur Folge, dass sich die Deviatorspannungen auch schneller abbauen. In Abb. 6.26 ist deutlich zu erkennen, dass in Nähe der Streckensohle die Deviatorspannungen durch die Überzugswirkung der Strecke beeinflusst werden und die Deviatorspannungen langsamer abnehmen als in größerer Entfernung von der Strecke. Insgesamt sind jedoch auch in diesem Bereich die Deviatorspannungen geringer als bei Salzgrus. Besonders ausgeprägt ist die Abnahme der Deviatorspannungen ab ca. 30 m Bohrlochteufe, da hier die Deviatorspannungen nach 10 Jahren Berechnungszeit bereits um  $\Delta\sigma \approx 4$  MPa unter den Deviatorspannungen liegen, die bei Salzgrus als Verfüllmaterial erhalten werden. Somit ist davon auszugehen, dass die effektive Gebirgsbelastung im Bereich der Bohrlochkontur bei angemischtem SVV günstiger sein wird als bei Salzgrus.

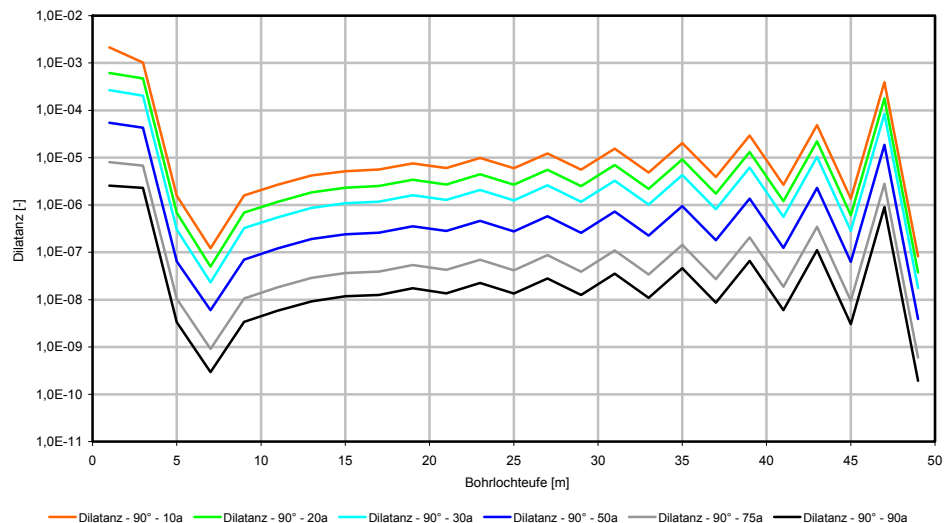


**Abb. 6.26** Deviatorspannungen in den Konturzonen in  $\alpha = 0^\circ$ -Richtung

Auch die Verschiebungen entlang der Bohrlochkontur zeigen bei angemischtem SVV als Versatzmaterial qualitativ einen vergleichbaren Verlauf zu den Verschiebungen bei Salzgrus. Quantitativ sind die Verschiebungen der Bohrlochkontur in radialer Richtung bei angemischtem SVV jedoch nur etwa halb groß wie bei Salzgrus. Dieser Befund erscheint plausibel, da der SVV nur etwa die halbe Anfangsporosität aufweist im Vergleich zu Salzgrus. In axialer Richtung (z-Richtung) sind die Verschiebungen bei Salzgrus und angemischtem SVV augenscheinlich identisch.

Wie Abb. 6.27 zeigt, sind die Verläufe der Dilatanz in den Konturzonen bei Salzgrus und angemischtem SVV qualitativ sehr ähnlich, quantitativ starten zwar alle Versatz-

materialien bei einer Berechnungszeit von 5 Jahren mit derselben Dilatanz, doch geht die Dilatanz bei angemischtem SVV stärker zurück als bei Salzgrus und ab einer Berechnungszeit von etwa 20 Jahren liegen die Zahlenwerte für die Dilatanz bei angemischtem SVV etwa konstant um den Faktor 2 unter denen bei Salzgrus, vermutlich aufgrund der größeren Radialspannungen, die die Rückbildung der Auflockerungszone begünstigen.

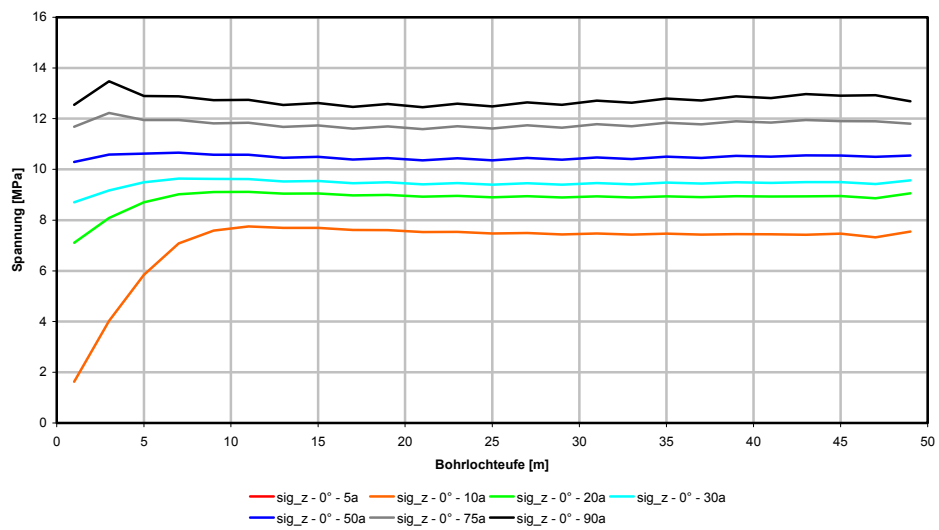


**Abb. 6.27** Dilatanzverläufe in den Konturzonen in  $\alpha = 90^\circ$ -Richtung

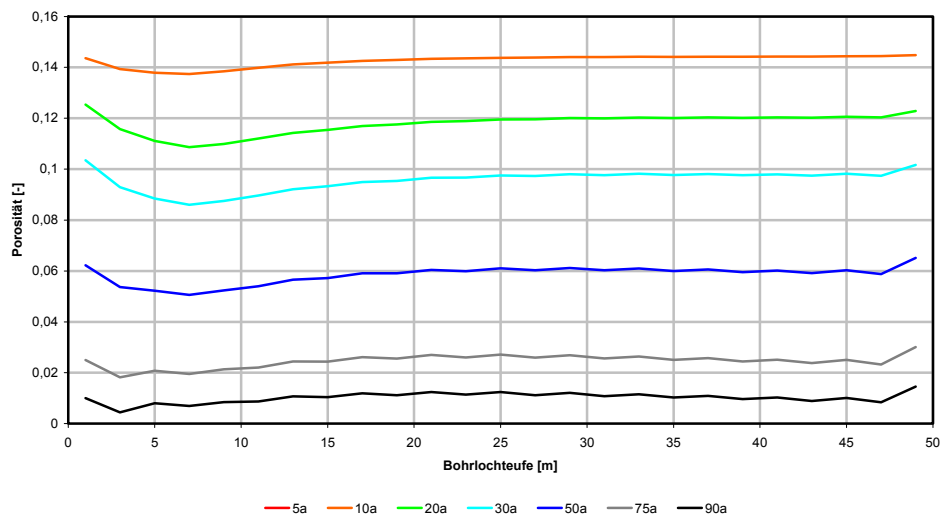
Deutliche Unterschiede zwischen Salzgrus und angemischtem SVV zeigen sich im Spannungsaufbau im Versatz, der bei angemischtem SVV besonders in den ersten Jahren wesentlich schneller erfolgt als bei Salzgrus. So hat sich z. B. nach 10 Jahren Berechnungszeit in Axialrichtung des Bohrlochs bereits eine Spannung von knapp  $\sigma_z \approx 8$  MPa aufgebaut, während beim Salzgrus nur eine Spannung von  $\sigma_z \approx 1$  MPa erreicht worden ist (Abb. 6.28). Der Endwert nach 100 Jahren Berechnungszeit ist bei angemischtem SVV um  $\sigma_z \approx 2$  MPa größer als bei Salzgrus.

Bei der Betrachtung der berechneten Porositäten im angemischten SVV ist aus Abb. 6.29 ersichtlich, dass der angemischte SVV im Vergleich zu Salzgrus etwa nur die halbe Anfangsporosität besitzt, im Rahmen der rechnerischen Simulation aber dennoch relativ stark kompaktiert wird und so in deutlich kürzerer Zeit deutlich geringere Porositäten erreicht. Die Kompaktionsfähigkeit ist in der Berechnung so groß, dass nach einer Berechnungszeit von ca. 94 Jahren in einzelnen Zonen eine rechnerische Porosität von  $\Phi = 0$  erreicht wird. Da hieraus ein Absturz der Berechnung resultiert, konnten die

Kurvenverläufe in Abb. 6.29 nur bis zu einer Berechnungszeit von 90 Jahren dargestellt werden.



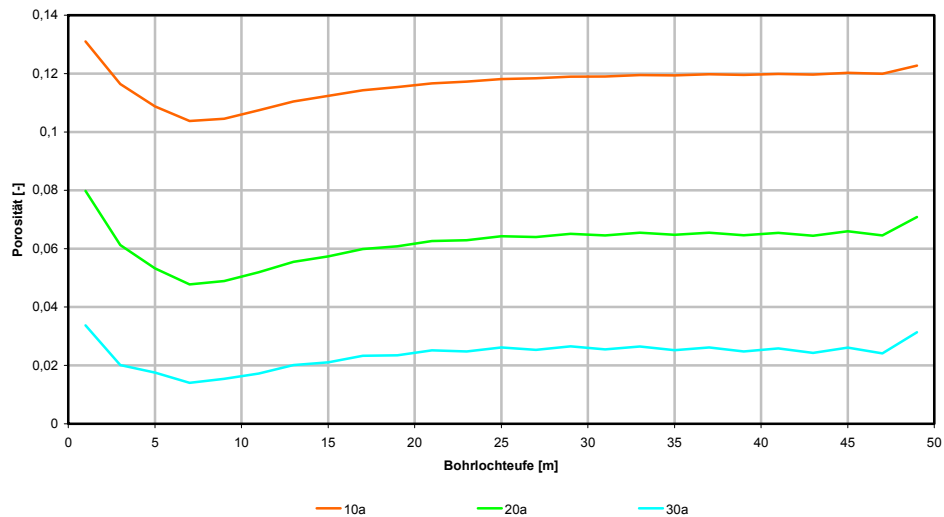
**Abb. 6.28** Axialspannungen (z-Richtung) in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs



**Abb. 6.29** Porosität des Versatzes in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs

Bei höheren Gebirgstemperaturen werden rechnerisch Porositäten von Null bereits nach noch kürzerer Zeit erreicht: Bei einer Gebirgstemperatur von  $T = 40\text{ °C}$  nach etwa 34 Jahren und bei  $T = 60\text{ °C}$  bereits nach weniger als 10 Jahren, so dass bei  $T = 60\text{ °C}$  keine Daten für einen Vergleich zu den anderen Berechnungen zur Verfügung stehen.

Abb. 6.30 zeigt, dass bereits eine Gebirgstemperatur von  $T = 40\text{ °C}$  ausreichend ist, um innerhalb weniger Jahrzehnte das Versatzmaterial so weit zu kompaktieren, dass es zumindest rechnerisch keinen Porenraum mehr aufweist und folglich auch keine vernetzten Wegsamkeiten mit einer Durchlässigkeit. Da das Versatzmaterial bereits kurz nach dem Einbau eine ähnliche hydraulische Dichtheit aufweist wie ungestörtes Steinsalz, liegt eine funktionstüchtige Verschlusskonstruktion vor.



**Abb. 6.30** Porosität des Versatzes in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs bei einer erhöhten Gebirgstemperatur von  $T = 40\text{ °C}$

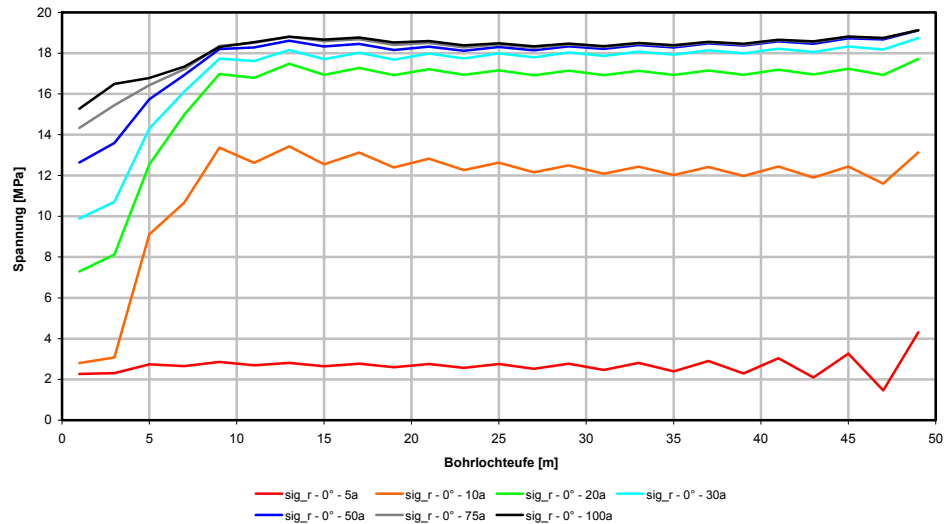
#### 6.4.5 Aufgesättigter SVV als Verschlussmaterial ohne Kristallisationsdruck

Für den aufgesättigten SVV wurde das Stoffmodell HOOKE verwendet, um seine eher steiferen mechanischen Eigenschaften in einem adäquaten physikalischen Modell abzubilden. Die Kriechfähigkeit des Materials wird dabei in Ermangelung von laborativen Untersuchungen vernachlässigt. Dementsprechend baut sich der Gebirgsdruck deutlich schneller auf und erreicht auch höhere Endwerte als bei Salzgrus oder auch angemischtem SVV (Abb. 6.31).

Unterstützt wird der schnellere Aufbau der Radialspannungen durch den kraftschlüssigen Einbau des Versatzes, der in der rechnerischen Simulation durch eine Ausbalancierung des Modells nach Einbringen des Versatzes zum Zeitpunkt  $t = 5$  Jahre angenähert wird und in der Berechnung bereits zu einem instantanen Aufbau eines Radialdruckes von  $\sigma_r \approx 2 - 3\text{ MPa}$  führt. Der schnelle Aufbau stagniert jedoch bereits nach 30 – 50 Jahren, und es ist abgesehen von den ersten 10 m Bohrlochteufe nahe-

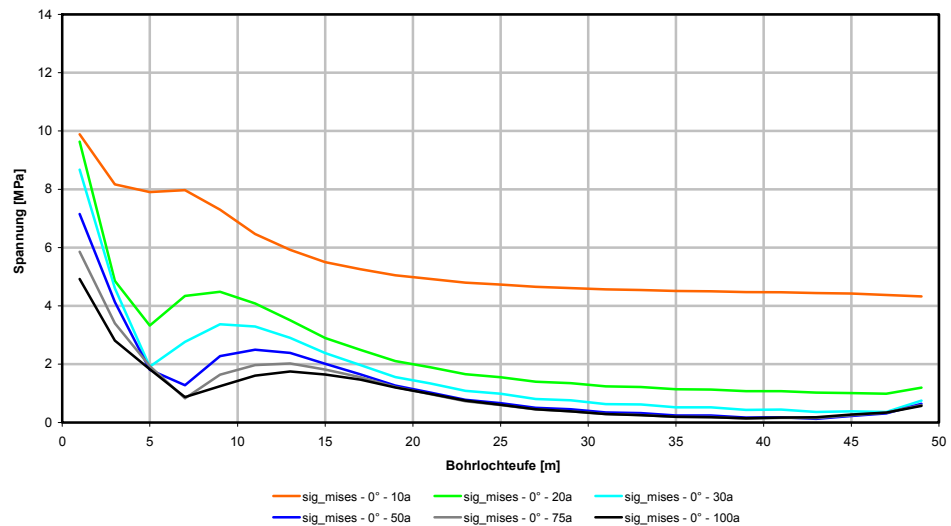


rungsweise der Endzustand erreicht. Ab einer Bohrlochteufe von etwa 10 m sind die Radialspannungen wie auch bei Salzgrus mit zunehmender Bohrlochteufe etwa konstant.



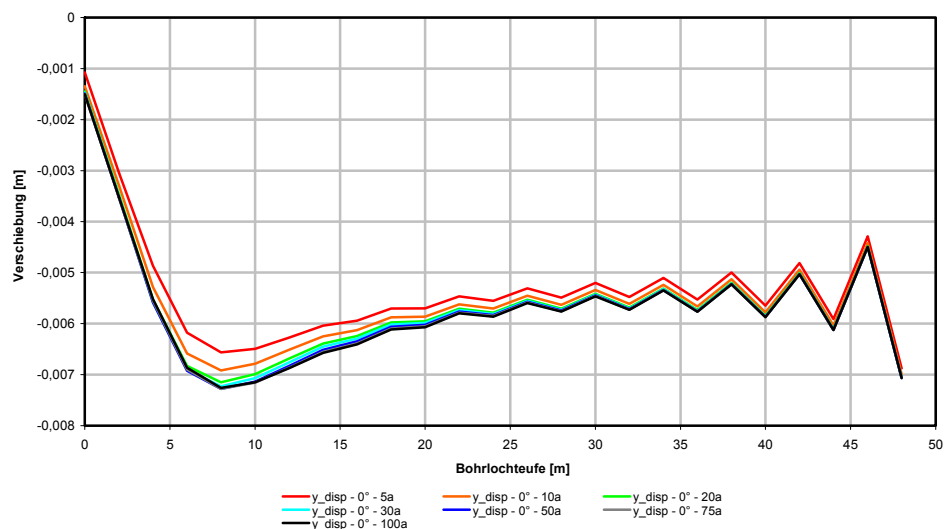
**Abb. 6.31** Radialspannungen in den Konturzonen in  $\alpha = 0^\circ$ -Richtung

Durch den besonders raschen Aufbau der Radialspannungen ist auch die Abnahme der Deviatorspannungen bei aufgesättigtem SVV deutlich stärker ausgeprägt als bei Salzgrus oder auch angemischtem SVV (Abb. 6.32). Der Verlauf der Deviatorspannungen zeichnet sich dadurch aus, dass die Spannungen nicht kontinuierlich mit der Bohrlochteufe abnehmen, sondern dass sich in einer Bohrlochteufe von 5 – 15 m ein Maximum ausbildet.



**Abb. 6.32** Deviatorspannungen in den Konturzon in  $\alpha = 0^\circ$ -Richtung

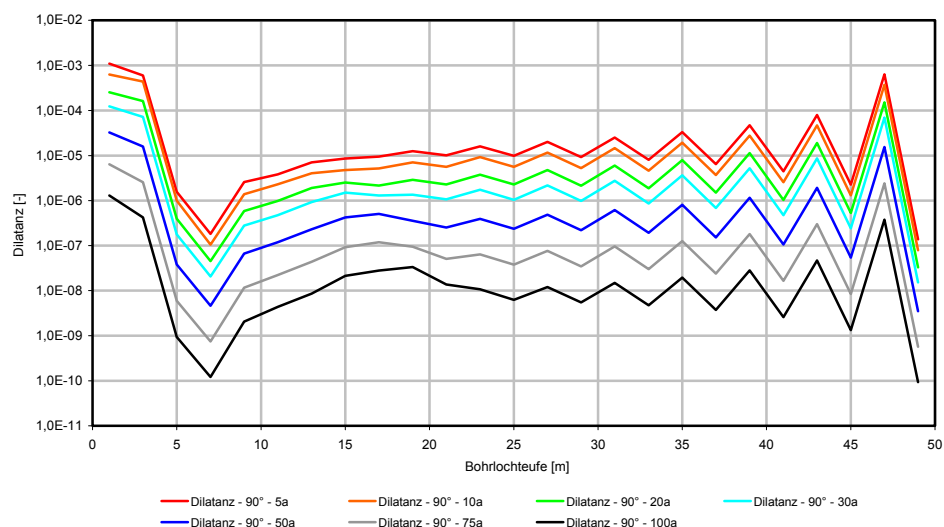
Die berechneten Verschiebungen sind infolge des von Anfang an geringen Porenraumes und des dadurch bedingten Verzichts auf den Ansatz eines Kompaktionsmodells deutlich kleiner als bei Salzgrus. An der Bohrlochkontur bei  $\alpha = 0^\circ$  sind nach Abb. 6.33 z. B. für die Verschiebungen in y-Richtung nur  $u_r = 5 - 7$  mm berechnet worden anstatt  $u_r = 1 - 4$  cm wie bei Salzgrus. Zudem findet der Großteil der Verformungen bereits bei der Ausbalancierung direkt nach der Einbringung des Versatzes statt. Während der nächsten 100 Jahre Berechnungszeit werden die Verschiebungen um nur noch maximal 10 % erhöht.



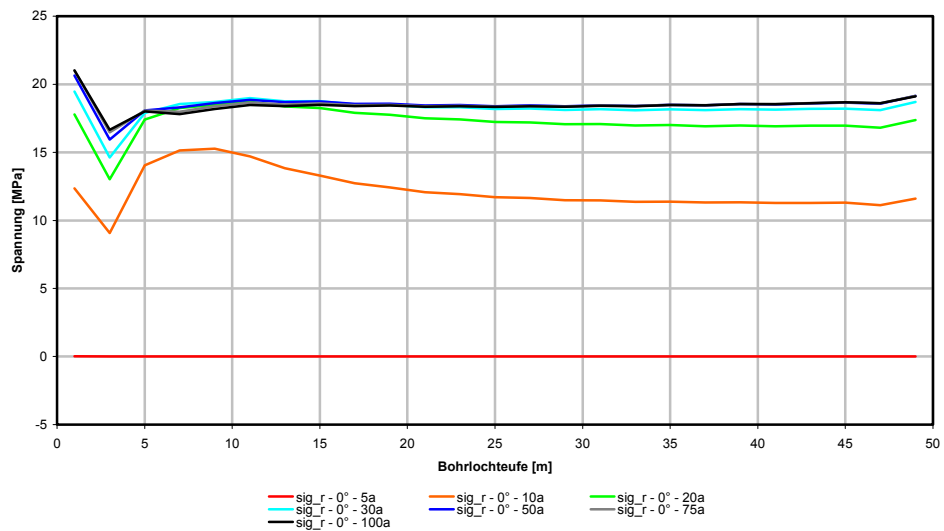
**Abb. 6.33** Verschiebungen in den Konturgitterpunkten bei  $\alpha = 0^\circ$  in y-Richtung

Die Dilatanz entlang der Bohrlochkontur entwickelt sich bei aufgesättigtem SVV zeitlich und räumlich ähnlich wie bei Salzgrus (Abb. 6.34). Insgesamt betrachtet liegt die Dilatanz bei aufgesättigtem SVV zunächst über der Dilatanz bei Salzgrus, doch bildet sich die Dilatanz bei aufgesättigtem SVV schneller zurück und weist daher nach einer Berechnungszeit von 100 Jahren geringere Zahlenwerte auf als die Dilatanz von Salzgrus. Qualitativ unterscheiden sich die Verläufe der Dilatanz dadurch, dass sich bei aufgesättigtem SVV im Lauf der Zeit ein zusätzliches Maximum im Bereich von 15 – 20 m Bohrlochteufe ausbildet. Somit führen die erhöhten Deviatorspannungen im Bereich von 15 – 20 m Bohrlochteufe zu einer Verzögerung der Dilatanzrückbildung bei aufgesättigtem SVV.

Bei der Betrachtung des Tragverhaltens des Versatzes zeigt sich, dass sich wie zu erwarten die Radialspannungen nicht nur in den Konturzonen, sondern auch im Versatz selbst deutlich schneller aufbauen als bei Salzgrus (Abb. 6.35). Bereits nach 10 Jahren sind Spannungen im Versatz erreicht worden wie sie bei Salzgrus erst nach 100 Jahren erreicht werden und schon nach bereits etwa 30 Jahren wird ein zeitlich näherungsweise konstanter Wert erhalten.

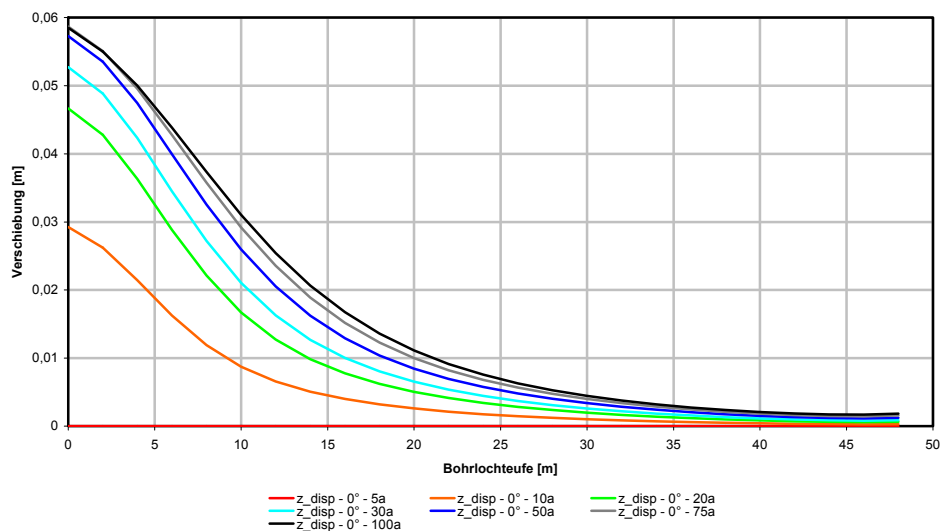


**Abb. 6.34** Dilatanz in den Konturzonen bei  $\alpha = 90^\circ$



**Abb. 6.35** Radialspannungen in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs

Der Verlauf der Verschiebungen entlang der Bohrlochvertikalachse in z-Richtung weist bei aufgesättigtem SVV im Vergleich zu Salzgrus einen weniger gekrümmten Verlauf auf (Abb. 6.36). In Folge dieses stärker linear geprägten Verlaufes sind die Verschiebungen in Streckennähe mit  $u_z \approx 6$  cm nach 100 Jahren nur etwa halb so groß wie bei Salzgrus, ab einer Bohrlochteufe von  $u_z \approx 10$  m dagegen sind die berechneten Verschiebungen bei aufgesättigtem SVV größer als bei Salzgrus.

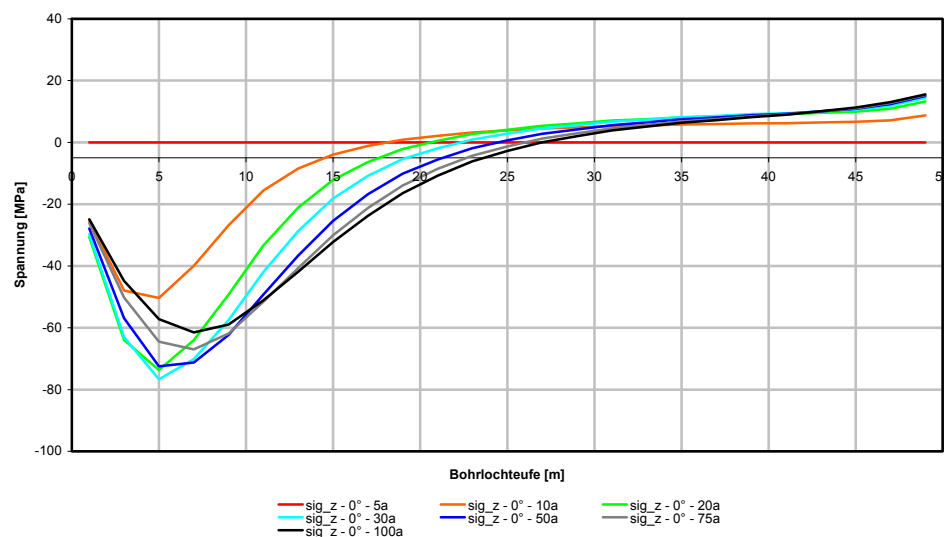


**Abb. 6.36** Verschiebungen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs in z-Richtung

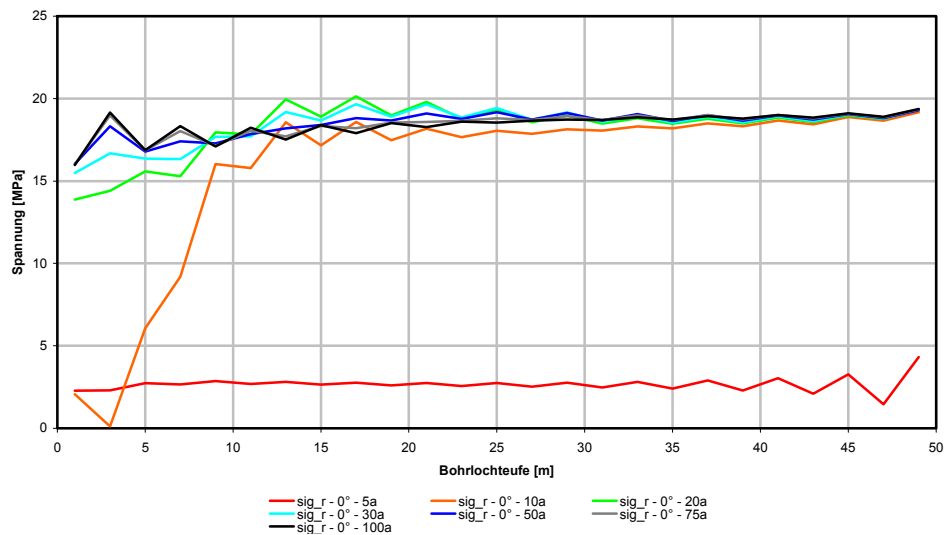
Das Kriechverhalten des Steinsalzgebirges ist für sich betrachtet in beiden Fällen a priori zunächst identisch und wird nur durch die unterschiedliche Tragwirkung des Ver-

satzes und die dadurch bedingten Spannungumlagerungen verändert. Der aufgesättigte SVV führt durch die Halbierung der Verschiebung in z-Richtung im Bereich der Streckensohle dazu, dass sich auch die Verschiebungen des umgebenden Salzgebirges in z-Richtung reduzieren. Ursache hierfür ist, dass der mit linear-elastischem Materialverhalten modellierte Versatz die viskosen Verschiebungen des Steinsalzgebirges in die Strecke hinein nur im begrenzten Umfang mitmachen kann und somit die Kriechdeformtaion des Steinsalzes in Streckennähe behindert, in größerer Teufe aber verstärkt. Für den aufgesättigten SVV folgt aus dem Kriechverformungsgradienten in z-Richtung, dass er in Nähe der Streckensohle stärker in Richtung der Streckensohle verschoben wird als in größerer Teufe. Folglich resultiert insgesamt eine Dehnung des Bohrlochversatzes in z-Richtung, die zu erheblichen Zugspannungen im Versatz in z-Richtung führt, Abb. 6.37. Diese Zugspannungen sind vermutlich verstärkt für die oben erwähnte Ausbildung des zusätzlichen Dilatanzmaximums verantwortlich.

Eine erhöhte Gebirgstemperatur von  $T = 60\text{ °C}$  führt wie bei Salzgrus dazu, dass sich die Spannungen im Versatz und in der Auflockerungszone deutlich schneller aufbauen und bereits nach 10 Jahren näherungsweise die Endwerte erreichen, wobei sich die maximalen Spannungen gegenüber einer Gebirgstemperatur von  $T = 22\text{ °C}$  noch etwas erhöhen (Abb. 6.38).



**Abb. 6.37** Spannungen in z-Richtung in der Vertikalachse des Bohrlochs



**Abb. 6.38** Radialspannungen in den Konturzonen in  $\alpha = 0^\circ$ -Richtung bei  $T = 60^\circ \text{C}$

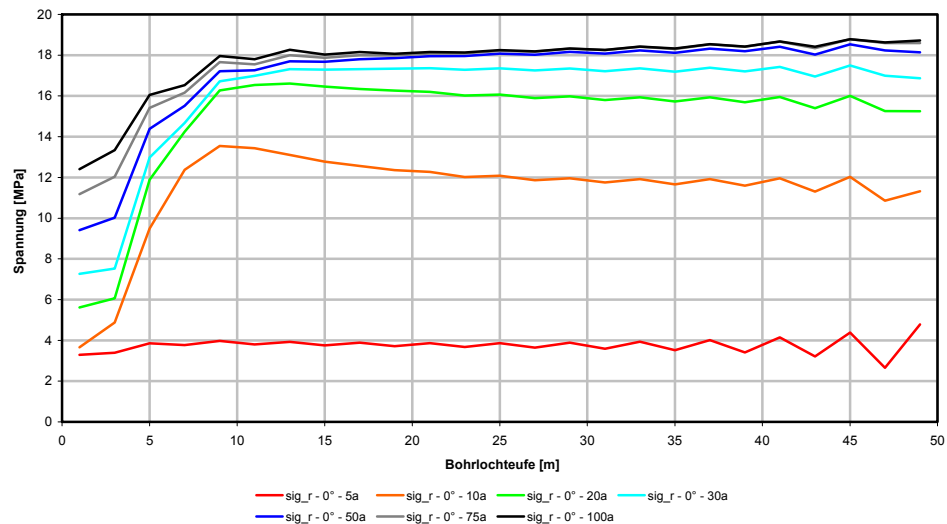
Auch die weiteren Zustandsgrößen folgen in ihrem Verhalten dieser Tendenz. So verhalten sich die Verschiebungen qualitativ ähnlich wie die Spannungen: Die Endwerte werden deutlich schneller erreicht und liegen geringfügig höher. Die Dilatanz in den konturnahen Gebirgsbereichen in Nähe der Strecke ist bei  $T = 60^\circ \text{C}$  Gebirgstemperatur nach 10 Jahren größer als bei  $T = 22^\circ \text{C}$ , bildet sich ab dann jedoch schnell zurück. Ab etwa 10 m Bohrlochteufe ist die Entwicklung der Dilatanz für beide Gebirgstemperaturen nahezu identisch.

#### 6.4.6 Aufgesättigter SVV als Verschlussmaterial mit Kristallisationsdruck

Eine wichtige materialtechnische Eigenschaft des aufgesättigten SVV besteht darin, dass aus der Aufsättigung des in das Bohrloch verbrachten trockenen SVV-Materials der Aufbau eines Kristallisationsdruckes im Bohrloch resultieren kann. Die genaue räumliche und zeitliche Ausbildung der Kristallisationsdruckentwicklung ist jedoch von der lokal-zonalen Sekundärmineralisation abhängig und damit unbekannt. Daher besteht das Ziel der Berechnungen nicht in der Simulation und anschließenden Bewertung des Verbundsystems aufgesättigter SVV-Steinsalzgebirge. Vielmehr soll lediglich auf hypothetischer Basis der Einfluss eines Kristallisationsdruckes auf das umgebende Steinsalzgebirge untersucht werden. Für die Berechnungen wird dabei von der Hypothese ausgegangen, dass sich der Kristallisationsdruck instantan mit der Aufsättigung einstellt und einen Kontaktdruck auf die Bohrlochwandung ausübt. Der Kristallisationsdruck in Richtung der Strecke wird dabei vernachlässigt, da sich in die noch nicht verfüllte Strecke mangels hinreichender Behinderung der Volumenausdehnung auch kein

Kristallisationsdruck aufbauen kann und nach den 5 Jahren Standzeit bis zur Verfüllung der Strecke keine weitere Kristallisationsentwicklung mehr zu erwarten ist. Zudem wird davon ausgegangen, dass der Kristallisationsdruck als räumlich und zeitlich konstanter zusätzlicher Druck innerhalb des Versatzes und auf die Bohrlochkontur wirkend betrachtet werden kann, da der Kristallisationsdruck zwar abhängig von der Volumenvergrößerung des Versatzmaterials ist, im Bohrloch jedoch die Querdehnung soweit behindert ist, dass sich der Kristallisationsdruck auch entsprechend den laborativen Befunden aufbauen kann und bestehen bleibt. Im Lauf der Zeit ist konvergenzbedingt nur von einer weiteren Kompaktion des Versatzes auszugehen und eine Entspannung des Versatzes nicht zu erwarten. Ausgehend von den Befunden aus den in Kap. 3.3.2.2 beschriebenen Laborversuchen wurde ein Kristallisationsdruck von  $P_k = 5 \text{ MPa}$  angenommen.

Wie Abb. 6.39 zeigt, wirkt sich der Kristallisationsdruck auf die Radialspannung in den Konturzonen überraschend gering aus: Nach der Ausbalancierung ist die Spannung in den Mittelpunkten der Konturzonen nur knapp 2 MPa höher als ohne Kristallisationsdruck. Der aufgebrachte Kristallisationsdruck von  $P_k = 5 \text{ MPa}$  wird folglich nicht vollständig an der Kontur wirksam, sondern nur zu ca. 80 %, wodurch die Radialspannung auf  $\sigma_r \approx 4 \text{ MPa}$  erhöht wird. Als Ursache für den verminderten Kristallisationsdruck ist anzusehen, dass der Versatz sich zunächst in Folge der Wirkung des vollen Kristallisationsdrucks von  $P_k = 5 \text{ MPa}$  mit Komprimierung des umgebenden Steinsalzgebirges ausdehnt, durch die Volumenvergrößerung jedoch der Kristallisationsdruck entsprechend dem im Stoffmodell HOOKE enthaltenen Kompressionsmodul wieder reduziert wird. Im Endzustand resultiert somit ein geringerer Kristallisationsdruck als ursprünglich angesetzt, der auf die Bohrlochkontur stützend einwirkt.

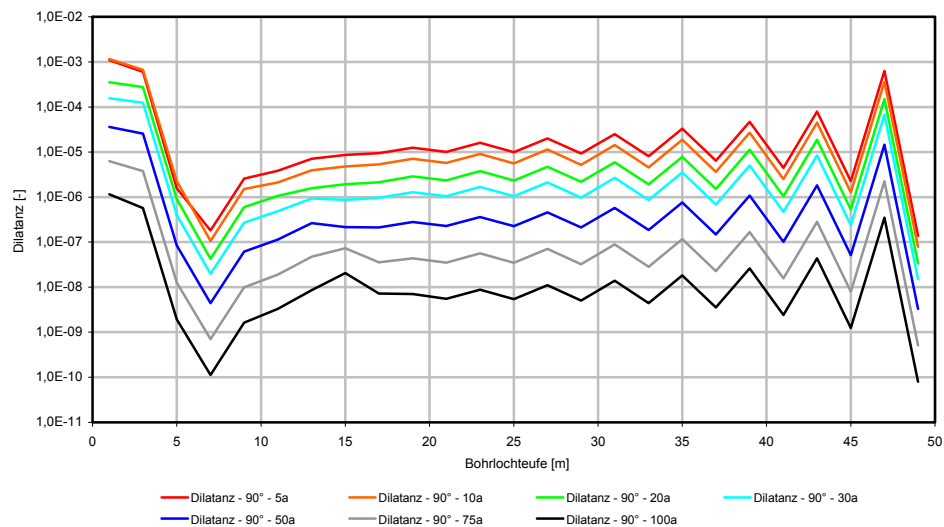


**Abb. 6.39** Radialspannungen in den Konturzonen bei 0°

Abb. 6.31 zeigt, dass der instantanen Erhöhung der Radialspannungen um  $\Delta\sigma \approx 4$  MPa durch den Kristallisationsdruck eine zeitbezogen relativ kurzfristige Erhöhung der Radialspannungen durch Konvergenz gegenübersteht ( $\Delta\sigma_r \approx 10$  MPa innerhalb der ersten 5 Jahre Berechnungszeit). Die anfängliche Erhöhung der Radialspannungen durch den Kristallisationsdruck wird bereits nach mehreren Monaten (der genaue Zeitpunkt variiert mit der Bohrlochteufe) durch die ansteigenden Gebirgsspannungen egalisiert, so dass der gebirgsmechanisch günstige Effekt des Kristallisationsdruckes nur für einen doch relativ begrenzten Zeitraum zusätzlich vorliegt. Resultierend aus dem Kristallisationsdruck verbleiben somit lediglich etwas geringere Verschiebungen.

Durch den geringen Einfluss des Kristallisationsdruckes auf die Spannungen und Verschiebungen ist der Einfluss auf die Dilatanz entsprechend ebenfalls als nur gering zu vermuten. Wie zu erwarten sind die Verläufe der Dilatanz nach Abb. 6.40 nahezu identisch mit den Verläufen der Dilatanz ohne Ansatz eines Kristallisationsdruckes (Abb. 6.34). Der größte Unterschied zeigt sich bei dem oben erwähnten und im Vergleich zu Salzgrus nicht vorhandenen Maximum bei einer Bohrlochteufe von etwa 15 – 20 m, das mit Ansatz eines Kristallisationsdruckes geringer ausfällt.



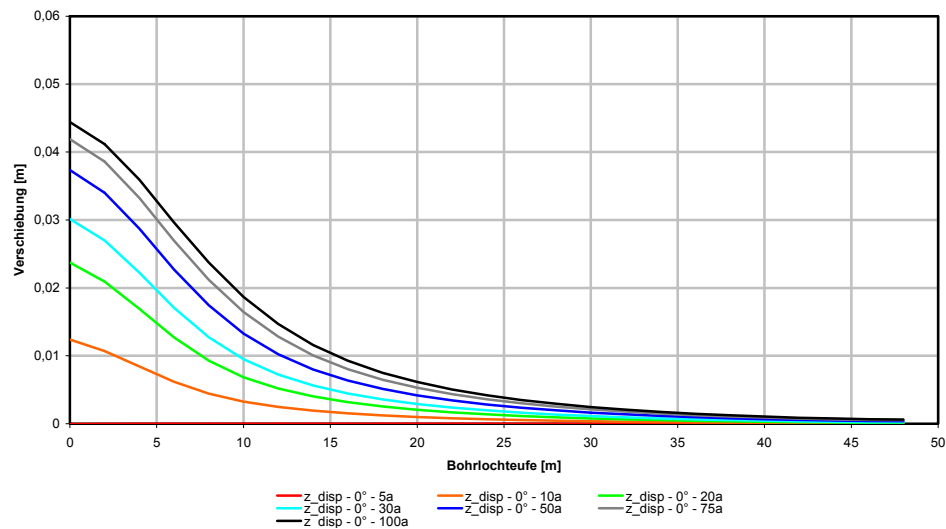


**Abb. 6.40** Dilatanz in den Konturzonen in  $\alpha = 90^\circ$ -Richtung

Eine weitere Wirkung des Ansatzes eines Kristallisationsdruckes ist ein Rückgang der Verschiebungen in z-Richtung im Versatz (Abb. 6.41). Nach einer Berechnungszeit von 100 Jahren werden statt  $u_z = 5,85$  cm an der Streckensohle nur  $u_z = 4,44$  cm erreicht.

Die Erhöhung der Gebirgstemperatur von  $T = 22^\circ\text{C}$  auf  $T = 60^\circ\text{C}$  bewirkt im Grundsatz entsprechend den Berechnungen ohne Kristallisationsdruck einen schnelleren Aufbau und höhere Endwerte in den Spannungen, etwas größere Verschiebungen und abgesehen von den ersten 5 m des Bohrlochs geringfügig kleinere Dilatanzwerte. Auch im Versatz kommt es zu einem deutlich schnelleren Aufbau und letztlich größeren Spannungen, in radialer und tangentialer Richtung Druckspannungen, in axialer Richtung Zugspannungen.

Anzumerken ist an dieser Stelle, dass die Zugspannungen mit bis zu 80 MPa bei einer Gebirgstemperatur von  $T = 22^\circ\text{C}$  (Abb. 6.37) bzw. 175 MPa bei einer Gebirgstemperatur von  $T = 60^\circ\text{C}$  rechnerisch so groß sind, dass in der Praxis mit großer Sicherheit von einem Materialversagen (Rissbildung) und einer entsprechenden Steifigkeitsverminderung ausgegangen werden kann. Dieses Materialversagen ist in oben vorgestellten Berechnungen jedoch nicht berücksichtigt.



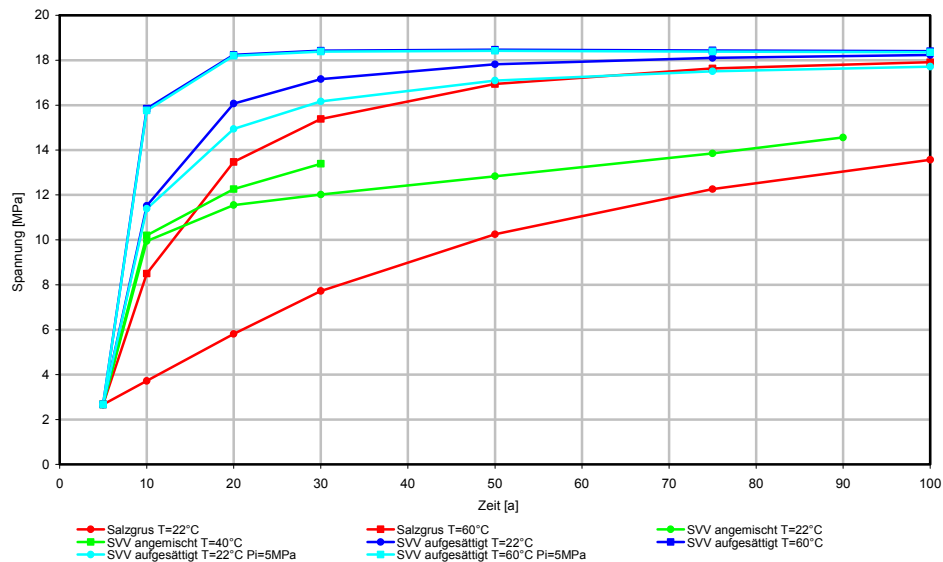
**Abb. 6.41** Verschiebungen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs in z-Richtung

## 6.5 Diskussion und Zusammenfassung

Im Hinblick auf einen Vergleich zwischen den einzelnen Versatzmaterialien bezüglich ihrer Auswirkung auf das Tragverhalten von Steinsalzgebirge und Verschlusskonstruktion sind im Folgenden für jedes Versatzmaterial zu jedem Zeitpunkt die Mittelwerte entlang der Kontur bzw. der Vertikalachse des Bohrlochs herangezogen und daraus die zeitlichen Entwicklungen der einzelnen Zustandsgrößen abgeleitet worden.

Bei der Betrachtung der sich im Laufe der Zeit aufbauenden Radialspannungen zeigt Abb. 6.42, dass sich die Radialspannung am schnellsten bei dem Material mit der größten Steifigkeit (aufgesättigter SVV) und am langsamsten bei dem Material mit der größten Steifigkeit und dem größten Kompaktionsvermögen (Salzgrus) aufbaut. Ein in den Berechnungen mit aufgesättigtem SVV angenommener Kristallisationsdruck von  $P_k = 5 \text{ MPa}$  zeigt überraschend nur relativ minimale Veränderungen in den Spannungen, Verschiebungen und in der Auflockerungszone.

Eine erhöhte Gebirgstemperatur führt bei allen Versatzmaterialien zu einem schnelleren Aufbau der Radialspannungen. Besonders ausgeprägt ist diese Tendenz bei Salzgrus, wo sich die Radialspannungen bei angehobener Gebirgstemperatur in den ersten 30 Jahren verdoppeln. Vergleichsweise gering ist der Einfluss der Gebirgstemperatur bei angemischtem SVV, wobei hier anzumerken ist, dass nur mit einer erhöhten Gebirgstemperatur von  $T = 40 \text{ °C}$  bis zu einer Berechnungszeit von 30 Jahren gerechnet werden konnte.

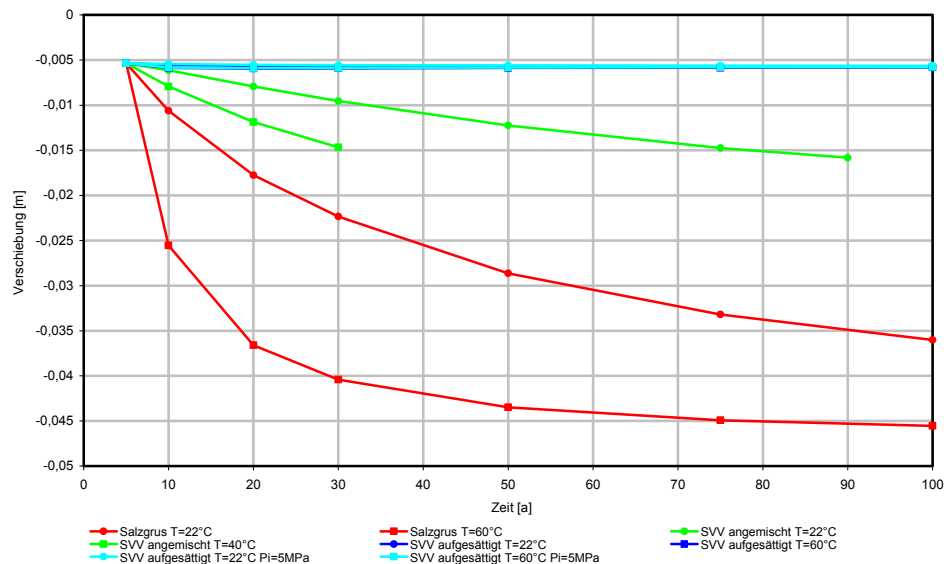


**Abb. 6.42** Entwicklung der durchschnittlichen Radialspannung in den Konturzon in  $\alpha = 0^\circ$ -Richtung (y-Richtung) für die verschiedenen Versatzmaterialien und unterschiedliche Gebirgstemperaturen

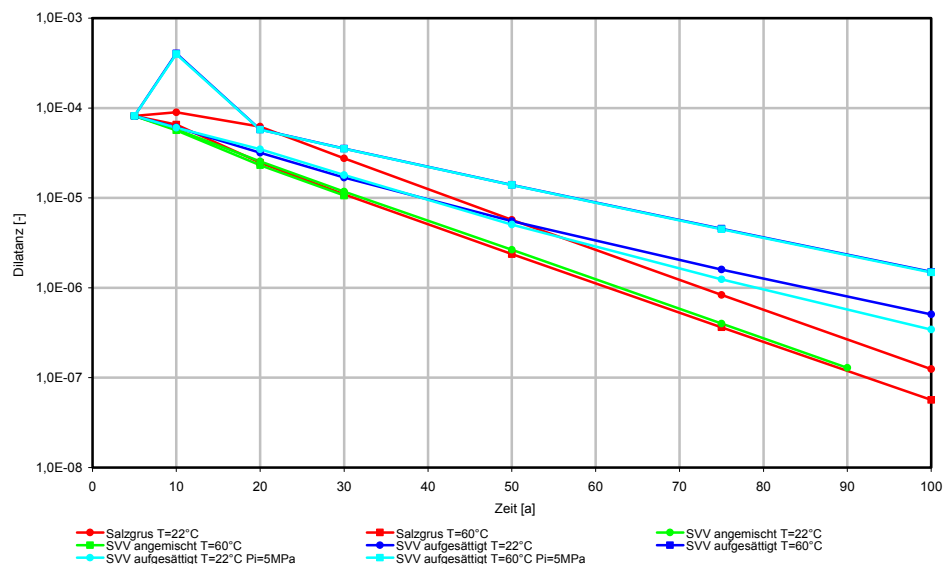
Entsprechend dem Aufbau der Radialspannungen sind die Verschiebungen in z-Richtung beim Material mit der größten Steifigkeit (aufgesättigter SVV) mit weniger als  $u_z = 1$  mm am geringsten und bei Salzgrus mit  $u_z = 36$  bzw. 46 mm am größten. Der Kristallisationsdruck bewirkt eine Verringerung der Verschiebungen in z-Richtung. Die Temperatur führt bei aufgesättigtem SVV nur zu minimal größeren Verschiebungen, da das Material schon von Anfang an sehr steif ist, dagegen bei angemischtem SVV oder Salzgrus zu deutlich größeren Verschiebungen (Abb. 6.43).

Wesentlich für die Dichtwirkung der Verschlusskonstruktion sind jedoch nicht die berechneten Spannungen oder Verformungen im Versatzmaterial, sondern die Porosität des Versatzmaterials auf der einen Seite und die Ausbildung und anschließende Rückbildung der Auflockerungszone im konturnahen Gebirge auf der anderen Seite, maßgeblich beschrieben durch die Dilatanz. Die zeitliche Entwicklung der Dilatanz ist in Abb. 6.44 dargestellt und zeigt, dass trotz der größten Radialspannung bei aufgesättigtem SVV die Dilatanz überraschend nicht am kleinsten, sondern am größten ist, vermutlich bedingt durch die auftretenden Zugspannungen in z-Richtung. Die schnellste Dilatanzrückbildung wird bei angemischtem SVV bzw. Salzgrus bei einer Gebirgstemperatur von  $T = 60^\circ\text{C}$  erreicht. Bei angemischtem SVV sind die Dilatanzverläufe kaum temperaturabhängig und bei einer Gebirgstemperatur von  $T = 22^\circ\text{C}$  werden bereits fast identische Dilatanzrückgänge erreicht wie bei  $T = 40^\circ\text{C}$ . Bei Salzgrus macht

sich die Temperatur dagegen deutlich bemerkbar, so dass bei einer Gebirgstemperatur von  $T = 60^\circ\text{C}$  nur etwa die halbe Dilatanz vorliegt wie bei  $T = 22^\circ\text{C}$ . Der Kristallisationsdruck hat insgesamt gesehen eine eher vernachlässigbare Auswirkung auf die Dilatanz.



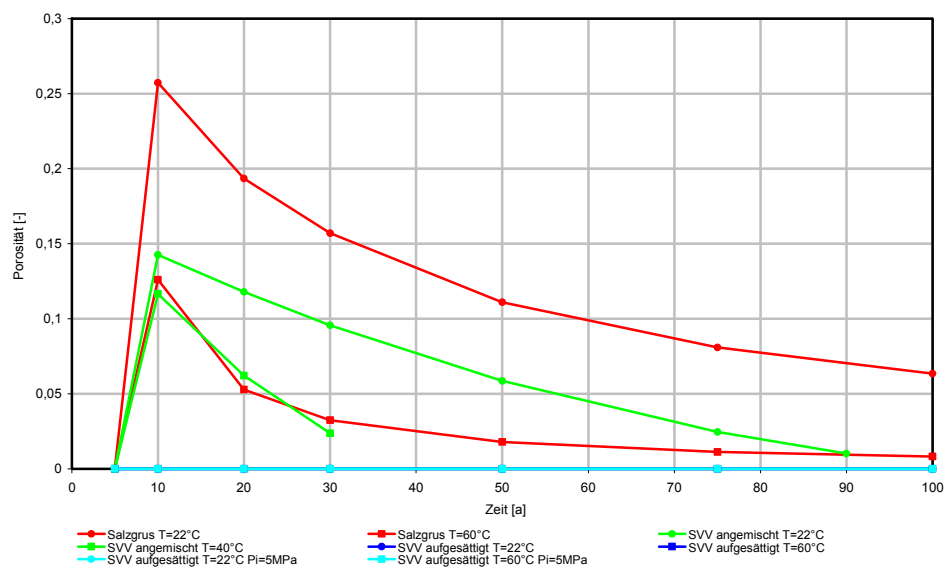
**Abb. 6.43** Entwicklung der durchschnittlichen Verschiebung in den Konturzonen in  $\alpha = 0^\circ$ -Richtung (y-Richtung) für die verschiedenen Versatzmaterialien und unterschiedliche Gebirgstemperaturen



**Abb. 6.44** Entwicklung der durchschnittlichen Dilatanz in den Konturzonen in  $\alpha = 0^\circ$ -Richtung (y-Richtung) für die verschiedenen Versatzmaterialien und unterschiedliche Gebirgstemperaturen

Entgegen den Erwartungen führt bei aufgesättigtem SVV eine höhere Gebirgstemperatur zu einer höheren Dilatanz anstatt zu einer niedrigeren. Eine Ursache hierfür könnte darin liegen, dass der mit einem linear-elastischen Materialverhalten modellierte Versatz den Kriechbewegung des Steinsalzes entgegen wirkt und so die Rückbildung der Auflockerungszone behindert.

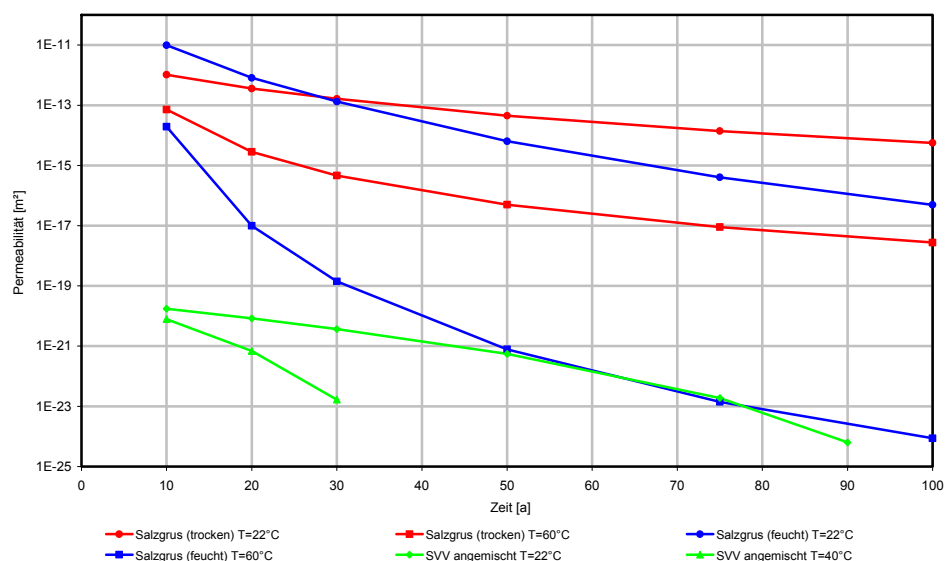
Die im Lauf der Zeit berechneten Porositäten von Salzgrus liegen bedingt durch die erhöhte Anfangsporosität deutlich über denen von angemischtem SVV. Die Gebirgstemperatur hat bei beiden Materialien einen signifikanten Einfluss auf die Porositätsentwicklung und führt bei höheren Werten zu einer deutlich schnelleren Rückbildung der Porosität (Abb. 6.45). Für den aufgesättigten SVV ist bedingt durch das angesetzte Stoffmodell HOOKE ohne expliziten Ansatz einer Porosität gerechnet worden und somit sind alle diesbezüglichen Rechenwerte Null.



**Abb. 6.45** Entwicklung der durchschnittlichen Porosität entlang der Vertikalachse des Bohrlochs

Für angemischten SVV kann über die in Kap. 4.2 ermittelte Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung den berechneten mittleren Porositäten eine genäherte mittlere Permeabilität zugeordnet werden. Für Salzgrus sind Porositäts-Permeabilitäts-Beziehungen für trockenen und feuchten Salzgrus aus [FEI 96] verwendet und die daraus berechneten Permeabilitäten zusammen mit denen des angemischten SVV in Abb. 6.46 dargestellt worden. Hier zeigt sich deutlich ein Vorteil des angemischten SVV, der gegenüber dem Salzgrus eine wesentlich niedrigere Anfangspermeabilität besitzt, dadurch bereits zu

Beginn der Berechnung eine sehr geringe Permeabilität von  $K_{5a} < 10^{-20} m^2$  aufweist und somit von Anfang an im Grundsatz einen dichten Verschluss gewährleisten kann. Der trockene Salzgrus ist ohne erhöhte Gebirgstemperatur innerhalb von 100 Jahren Berechnungszeit mit  $K_{100a} \approx 5,6 \cdot 10^{-15} m^2$  nicht in der Lage, einen dichten Verschluss zu gewährleisten, der feuchte Salzgrus mit  $K_{100a} \approx 4,93 \cdot 10^{-17} m^2$  und der trockene Salzgrus bei erhöhter Gebirgstemperatur von  $T = 60^\circ C$  mit  $K_{100a} \approx 2,74 \cdot 10^{-18} m^2$  erreichen auch nur eine mäßige Abdichtwirkung. Eine gute Abdichtwirkung erreicht erst der feuchte Salzgrus bei einer erhöhten Gebirgstemperatur von  $T = 60^\circ C$ , jedoch ist auch hier im Gegensatz zum angemischten SVV erst nach ca. 30 Jahren von einer hinreichenden Abdichtung mit  $K_{30a} \approx 1,42 \cdot 10^{-19} m^2$  auszugehen. Die Berechnungen zeigen somit, dass es zunächst grundsätzlich fraglich und somit Standortbezogen sehr sorgfältig zu untersuchen ist, ob mit Salzgrus als Verschlussmaterial der Nachweis eines dichten Verschlusses innerhalb akzeptabler Zeit erreicht werden kann. Sie sind somit in grundsätzlicher Übereinstimmung mit den Aussagen von Zhang und Stührenberg ([STÜ 96]).



**Abb. 6.46** Entsprechend den mittleren Porositäten berechnete zeitliche Entwicklung der Permeabilitätsverläufe für Salzgrus und angemischten SVV

Weiterhin kann festgehalten werden, dass die Berechnungen zeigen, dass bei Verfüllung eines längeren Bereiches des Bohrlochs mit einem relativ steifen nicht viskosen Material wie dem aufgesättigten SVV signifikante Zugspannungen im Material auftreten, die zwar die Rückbildung der Auflockerungszone nur in geringem Maße behindern, in der Praxis jedoch ein Materialversagen des Verfüllmaterials parallel zur Bohr-

lochachse durch Zugspannungsbedingte Trennbrüche wahrscheinlich machen. Dieser Bereich des mit SVV versetzten Bohrlochs kann nicht als Verschluss angesehen werden.

Ein Kristallisationsdruck von  $P_k = 5 \text{ MPa}$  führt entsprechend den Berechnungsergebnissen nur zu unwesentlichen Veränderungen in den zeitlichen und räumlichen Entwicklungen der Spannungen, Verschiebungen und der Dilatanz. Ursächlich für die überraschend geringen Auswirkungen des Kristallisationsdruckes ist zum einen, dass das Bohrloch durch den Kristallisationsdruck aufgeweitet wird und durch die damit verbundene Volumenvergrößerung des Bohrlochs der Kristallisationsdruck eigentlich herabgesetzt wird (Verbundsystem Gebirge – SVV) und zum anderen, dass die sich aufbauenden Gebirgsspannungen bei dem bereits von Anfang an steifen Material (aufgesättigter SVV) schon nach Monaten größer sind als der Kristallisationsdruck.

Daraus folgt, dass mit dem einfachen Verbundmodell Gebirge-SVV und dem als Randlast auf die Bohrlochkontur angesetzten Kristallisationsdruck das tatsächliche Geschehen nur unzureichend abgebildet wird. Erforderlich ist ein physikalisches Modell, das den Kristallisationsdruckentwicklungsprozess in Abhängigkeit auch von einem während des Kristallisationsprozesses veränderlichen Volumen beschreibt (bisher Versuche in Stahlzellen: konstantes Volumen).

Im Bezug auf das umgebende Steinsalzgebirge kann aus den Berechnungen abgeleitet werden, dass für den gewünschten Effekt einer schnelleren Rückbildung der Auflockerungszone zumindest ein deutlich höherer Kristallisationsdruck angesetzt werden müsste, z. B.  $P_k = 15 \text{ MPa}$ . Zusätzlich sollte gewährleistet werden, dass das Versatzmaterial Materialeigenschaften aufweist, z. B. die eines lockeren Verbundsystems, die ein Auftreten von Zugspannungen im Versatz verhindern.

Zugspannungen im Versatzmaterial treten bei Salzgrus und angemischtem SVV nicht auf, da beide Materialien deutlich verformbarer und damit weniger steif sind als der aufgesättigte SVV. Die Berechnungen zeigen im Fall des Salzgruses, dass ein Verschluss mit diesem Material prinzipiell machbar ist, doch bis zum Erreichen eines dichten Verschlusses in der Größenordnung 100 Jahre Kompaktionszeit erforderlich werden, wenn nicht die Kompaktion des Salzgruses z. B. durch eine erhöhte Gebirgstemperatur oder bautechnische Maßnahmen wie Anfeuchten des Salzgruses begünstigt wird.

Als am besten geeignet erweist sich der angemischte SVV, da er bereits direkt nach der Verfüllung einen sehr dichten Verschluss gewährleistet und dennoch so verformbar ist, dass die Kriechbewegungen des umgebenden Steinsalzgebirges in der Streckensohle zu keinen Zugspannungen im Versatzmaterial führen. In diesem Fall ist zu überlegen, ab welcher Bohrlochteufe das Versatzmaterial der Anforderung an ein Verschlussmaterial genügt. Zusätzlich benötigt der angemischte SVV keine erhöhte Gebirgstemperatur, um bereits frühzeitig einen dichten Verschluss zu gewährleisten. Er erscheint somit besonders für den Einsatz in Untertagedeponien ohne wärmeentwickelnde Abfälle geeignet.



## **7 Experimentelle Ergebnisse zur Durchströmung eines axial gelochten und mit SVV verfüllten Bohrkerns mit NaCl-Lösung**

### **7.1 Einleitung**

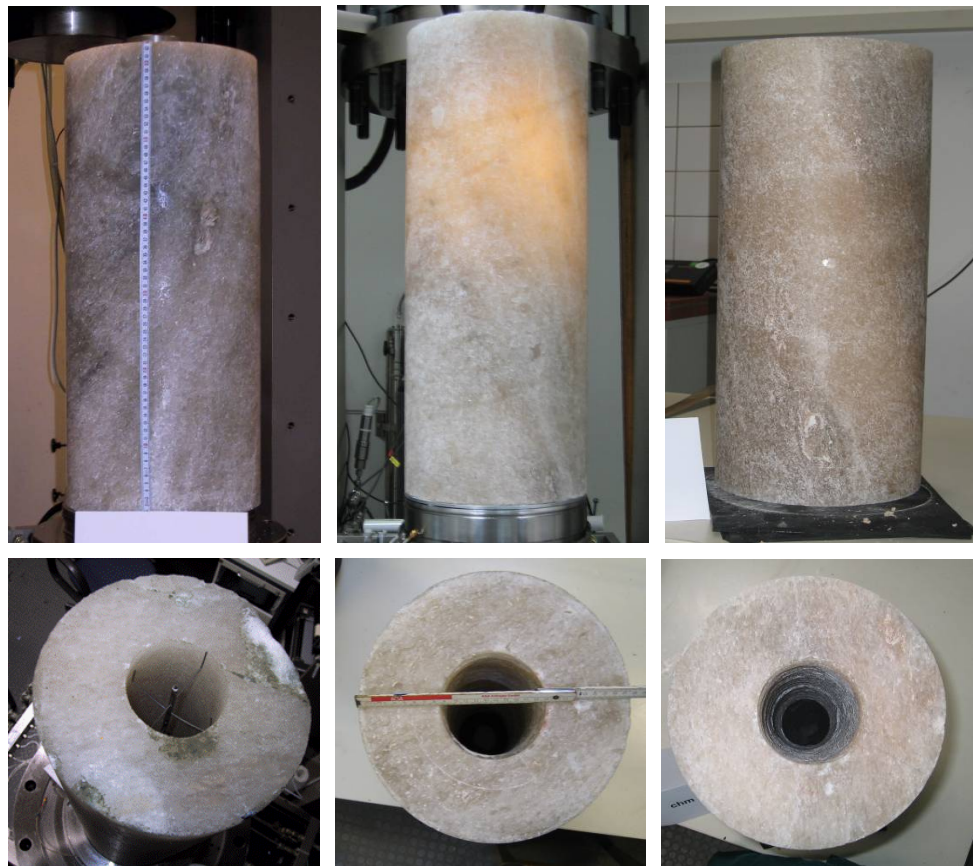
Im Rahmen des C:HM-Projekts wurden C:HM-Simulationsversuche an gelochten Großsalzkernen mit eingefülltem SVV-Material durchgeführt, um die hydraulische und mechanische Wirksamkeit des selbstverheilenden Versatzes zum Verschluss von Bohrlöchern in Salz zu untersuchen und auch die im Teilprojekt der TUC entwickelten C:HM-Kopplungsmodelle zu validieren. Im vorliegenden Laborbericht werden die gewonnenen Testergebnisse zusammengestellt.

### **7.2 Versuchsmaterialien**

Drei große Steinsalzkerne mit einem Durchmesser von 30 cm und unterschiedlichen Längen von 65 cm bis 75 cm wurden aus der 800 m-Sohle des Salzbergwerkes Asse entnommen. Die Probenachse verlief ca. 20° zur scheinbaren Schichtung. Es handelt sich um älteres grobkristallines Steinsalz mit einem Korndurchmesser von ca. 10 – 15 mm und mit leichten Anhydrit-Einschlüssen. Aus den Bohrkernen wurden drei zylindrische Prüfkörper zu einem Außendurchmesser von 28 cm, Innendurchmesser von 10 cm und jeweiliger Länge von 64, 67 und 70 cm präpariert. Abb. 7.1 zeigt die Fotos der hergestellten Prüfkörper. Während das Bohrloch im Prüfkörper CHM0 mit Hilfe einer automatischen Bohrmaschine hergestellt wurde, wurden die Bohrlöcher in CHM1 und CHM2 mit einer Handbohrmaschine erstellt. Dadurch sind die Bohrlochwände in CHM1 und CHM2 relativ rauer. Mit Reststücken wurden die Korndichte und der Wassergehalt nach Austrocknung bei 105 °C für 48 Stunden gemessen. Die Messung der Korndichte wurde mit einem Pyknometer unter Verwendung von Helium als Messgas durchgeführt. Die Porosität der Proben wurde wie folgt berechnet:

$$\phi = \left( 1 - \frac{\rho_d}{\rho_s} \right) \cdot 100 (\%) \quad (7.1)$$

mit  $\rho_d$  = Probedichte und  $\rho_s$  = Korndichte.



Salzprüfkörper CHM 0  
L/D/d = 67/28/10 cm

Salzprüfkörper CHM1  
L/D/d = 70/28/10 cm

Salzprüfkörper CHM2  
L/D/d = 64/28/10 cm

**Abb. 7.1** Große zylindrische Salzprüfkörper aus dem Salzbergwerk Asse

In Tab. 7.1 sind die gemessenen Parameter zusammengestellt. Infolge der rauen Oberfläche der Bohrlochwand sind die Volumen der Salzringe überschätzt. Somit ist die ermittelte Probedichte niedriger bzw. die bestimmte Porosität größer als die tatsächlichen Werte. An einem ungelochten Salzkern wurde die Probedichte von  $2,16 \text{ g/cm}^3$  gemessen und die Porosität von 0,55 % ermittelt.

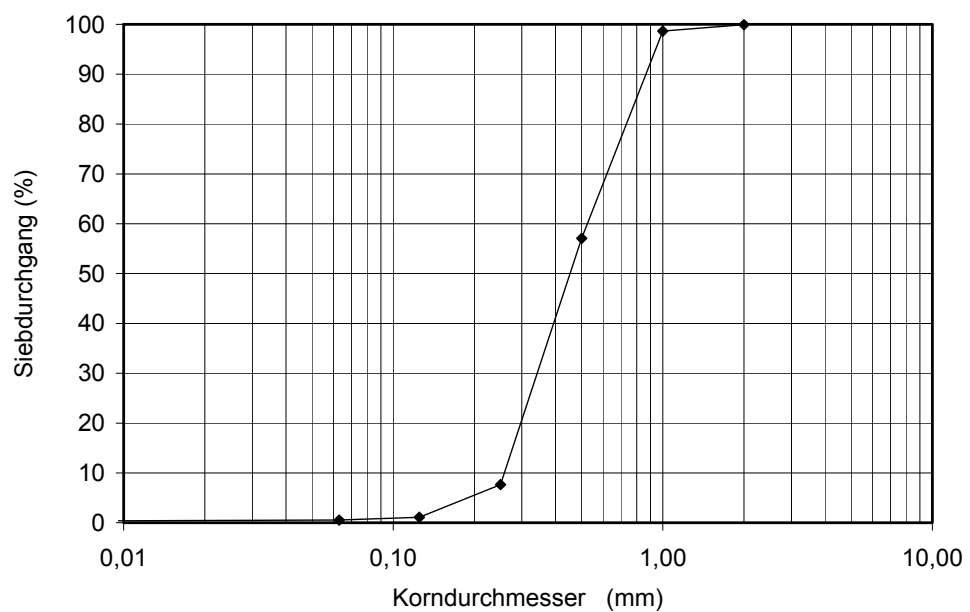
**Tab. 7.1** Physikalische Eigenschaften der Salzprüfkörper

| Prüfkörper | Probendichte $\rho_d$<br>[g/cm <sup>3</sup> ] | Korndichte $\rho_s$<br>[g/cm <sup>3</sup> ] | Porosität $\phi$<br>[%] | Wassergehalt $w$<br>[%] |
|------------|---|---|-------------------------|-------------------------|
| CHM 0      | 2,147   | 2,176                                       | 1,33                    | -                       |
| CHM1       | 2,120   | 2,170                                       | 2,30                    | 0,013                   |
| CHM2       | 2,156   | 2,172                                       | 0,74                    | 0,013                   |

Das SVV-Material (Magnesiumsulfat) wies eine Körnung von  $\leq 2$  mm auf. Die Korngrößenverteilung wurde nach DIN 18123 durch Siebung ermittelt und stellt sich wie folgt dar:

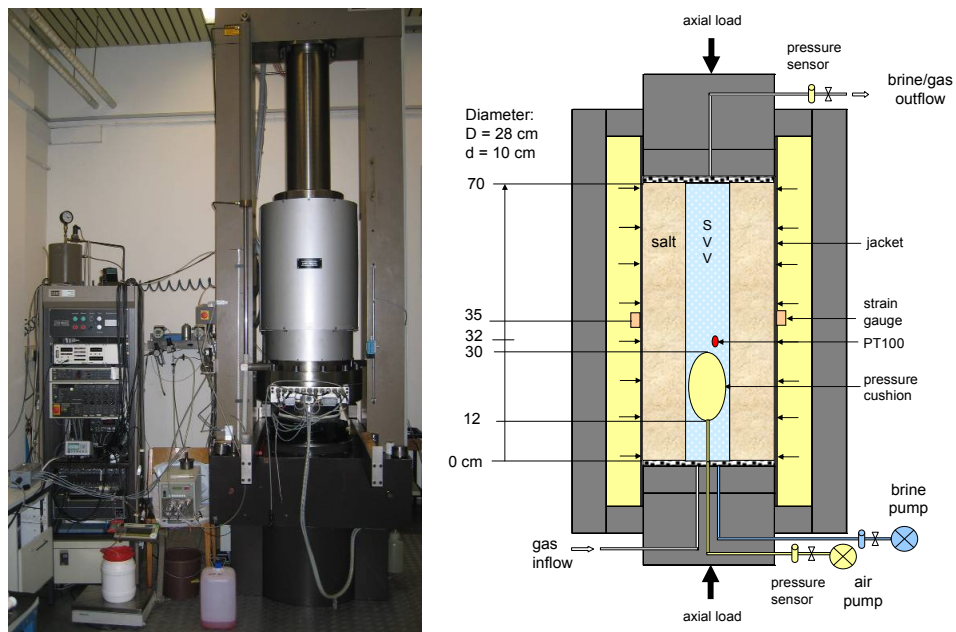
**Tab. 7.2** Korngrößenzusammensetzung des verwendeten SVV-Materials

| Korngrößenfraktion [mm] | Siebdurchgang [%] |
|-------------------------|-------------------|
| 2,000                   | 99,937            |
| 1,000                   | 98,635            |
| 0,500                   | 57,079            |
| 0,250                   | 7,651             |
| 0,125                   | 1,111             |
| 0,063                   | 0,571             |
| 0,000                   | 0,000             |

**Abb. 7.2** Korngrößenzusammensetzung des eingesetzten SVV-Materials

### 7.3 Versuchsverfahren

Ein Bohrlochverschluss in Salz wurde im Labor an gelochten Großsalzzylinder mit eingefülltem SVV-Material unter relevanten in-situ-Bedingungen in einer großen Triaxialprüfanlage simuliert. Die Prüfanlage ist auf eine große Probenabmessung von 28 cm Durchmesser und 70 cm Länge ausgelegt, wobei Axialspannung bis zu 70 MPa und Radialspannung bis zu 50 MPa individuell aufgebracht werden können. Mit einem zugehörigen hydraulischen System lässt sich die Durchlässigkeit eines beanspruchten Prüfkörpers mit Gas und Formationswasser messen. Gekoppelte mechanisch-hydraulische Versuche können auch bei erhöhten Temperaturen bis zu 150 °C durchgeführt werden. Abb. 7.3 zeigt eine schematische Darstellung des Versuchsprinzips für die Simulation gekoppelter C:HM-Prozesse im gesamten Salz-SVV-System.



**Abb. 7.3** Prinzipdarstellung der gekoppelten C:HM-Simulationsversuche an großen Salzring-Versatz-Proben in der GRS-Triaxialprüfanlage

Ein genereller Versuchsprozess wurde mit folgenden Schritten vorgesehen und mit gewisser Variation bei den einzelnen Versuchen durchgeführt:

1. **Probeneinbau:** Das Zentralbohrloch im Salzprüfkörper wird mit SVV-Material in mehreren Schichten (jeweils ca. 10 cm Dicke) verfüllt und mit einem Stampfer verdichtet. Zur Druck- und Temperaturmessungen im SVV wird ein Gummidruckkissen (D = 80 mm, L = 18 mm) und ein Temperatursensor PT100 im unteren Bohr-

lochbereich installiert. Danach wird der gesamte Prüfkörper mit Gummijackett (6,25 mm Dicke) ummantelt und in die Triaxialzelle eingebaut. Das mit Öl gefüllte Druckkissen wird nach Einstellung eines Vordrucks von ca. 1 bar geschlossen. Zur Messung der Radialverformung des Prüfkörpers wird ein MTS-Messring in der Probenmitte montiert. Nach der Instrumentierung wird für ca. 12 Stunden eine Vorlast von ca. 1 MPa auf den Prüfkörper aufgebracht und eine konstante Temperatur von 30 °C in der Zelle eingestellt. Die Fotos in Abb. 7.5 zeigen die Instrumentierung und den Probeneinbau.



**Abb. 7.4** Links: Druckkissen für Druckmessung im SVV-Material; Rechts: PT100 für Temperaturmessung im SVV-Material im Bohrloch

2. **Mechanische Beanspruchung:** Zur Erzeugung der Auflockerungszone (EDZ) um das Zentralbohrloch wird der Prüfkörper bei Erhöhung der Axial- und Radialspannung mit einer Rate von 0,1 MPa/min auf 15 MPa belastet. Während der mechanischen Belastung werden die Änderung des Öldrucks im Druckkissen und die resultierenden Axial- sowie Radialverformungen gemessen.
3. **Salzlösungsflutung:** Unter der mechanischen Beanspruchung wird eingefärbte gesättigte NaCl-Lösung von der unteren Seite mit einer HPLC-Pumpe bei Drücken von 2 bis zu 35 bar stufenweise in den SVV-Versatz injiziert. Jede Phase dauert 2 Tage und die letzte Phase 3 Wochen, um eine vollständige Aufsättigung des SVVs zu gewährleisten. Die Einfluss- und Ausflussmenge der Salzlösung wurde durch Wägung ermittelt. Durch die Flutung induzierten chemisch-mineralogischen Reaktionen im SVV-Material änderte sich die Temperatur und es baute sich ein Kristallisationsdruck auf. Die beiden Parameter werden mit Druckkissen und PT100 im Versatz gemessen. Außerdem wird die injizierte Lösungsmenge gemessen.



**Abb. 7.5** Instrumentierung und Probeneinbau

4. **Kriechkompaktion:** Vor Beginn der einwöchigen Kriechphase werden beide hydraulischen Ventile an der Probe geschlossen und der Prüfkörper weiterhin mit 15 MPa hydrostatisch belastet. Dabei wird mittels des Druckkissens ein sich eventuell im SVV-Material einstellender Druckaufbau messen. Um eine Vergleichbarkeit mit der früher durchgeführten Herstellung kleinerer SVV-Prüfkörper zu gewährleisten, wird die große SVV-Salzprobe danach einen Tag entwässert, d. h., die Hydraulikventile oben und unten werden geöffnet.
5. **Gaspermeabilitätsmessung:** Zur Beurteilung der Dichtwirkung des SVV-Versatzes wird die Gaspermeabilität des integralen Verschlusssystems durch Injektion von Stickstoff bei konstantem Druck mit einer Bürette gemessen und mit dem Wert vor der Salzlösungsflutung verglichen.
6. **Nachuntersuchungen:** Nach Entlastung wird der Prüfkörper ausgebaut und in Scheiben mit ca. 10 cm Dicke geschnitten, um Rissbildungen bzw. Wegsamkeiten im Salzring und SVV-Versatz sichtbar zu machen. Eventuelle Verfärbungen des Salzrings geben einen Hinweis auf die Eindringtiefe der Lösung in den Salzring. Zur Beurteilung der Integrität zwischen SVV und Salzring wird der Versatzkörper aus jeder Scheibe herausgedrückt und die Reibungskraft gemessen. Abschließend werden chemisch-mineralogische Analysen des SVV-Versatzes durchgeführt.

## 7.4 Datenauswertung

Während eines Versuchs werden folgende Parameter gemessen und ausgewertet:

- Axialspannung  $\sigma_a$ , die sich auf die Querschnittsfläche des Salzrings bezieht:

$$\sigma_a = \frac{F}{A_{ring}} = \frac{4 \cdot F}{\pi(D^2 - d^2)} \quad (7.2)$$

mit  $F$  = Axialkraft,  $A_{ring}$  = Querschnittsfläche des Salzrings,  $D$  = Außendurchmesser und  $d$  = Innendurchmesser des Salzrings.

- Radialspannung  $\sigma_r$ , die direkt vom Manteldruck oder Öldruck in der Triaxialzelle bestimmt wird.
- Axialverformung  $\varepsilon_a$ ,

$$\varepsilon_a = \frac{\Delta L}{L_o} = \frac{L_o - L}{L_o} \quad (7.3)$$

mit  $L_o$  = Anfangslänge der Probe und  $L$  = aktuelle Probenlänge.

- Radialverformung  $\varepsilon_r$ , die sich auf den Außerdurchmesser des Salzrings bezieht:

$$\varepsilon_r = \frac{\Delta D}{D_o} = \frac{D_o - D}{D_o} \quad (7.4)$$

mit  $D_o$  = Anfangsdurchmesser der Probe und  $D$  = aktueller Außerdurchmesser.

- Volumenverformung  $\varepsilon_v$ , die sich auf den gesamte SVV-Salz-Prüfkörper bezieht:

$$\varepsilon_v = \frac{\Delta V}{V_o} = \frac{V_o - V}{V_o} = 1 - \frac{L \cdot D^2}{L_o \cdot D_o^2} \quad (7.5)$$

mit  $V_o$  = Anfangsvolumen der Probe und  $V$  = aktuelles Volumen.

- Versatzdruck  $p$  (bar), Versatztemperatur  $T$  (°C), Injektionsdruck  $p_{in}$  (bar) und Injektionsmenge  $Q_{in}$  bzw. Austrittsmenge  $Q_{aus}$  (g) der Salzlösung sind direkt gemessen.

- Gaspermeabilität  $k_g$ , die sich auf den gesamte SVV-Salz-Prüfkörper bezieht, ist nach dem Darcy's Gesetz für kompressible Medien berechnet:

$$k_g = \frac{2 \cdot Q_g \cdot \mu_g \cdot L \cdot p_0}{A \cdot (p_1^2 - p_0^2)} \quad (7.6)$$

mit  $k_g$  = Gaspermeabilität ( $m^2$ ),  $q_g$  = Fließrate des Gases ( $m^3/s$ ),  $p_1$  = Injektionsdruck (Pa),  $p_0$  = Luftdruck (Pa),  $\mu_g$  = Viskosität des Gases (Pa·s),  $L$  = Probenlänge (m),  $A$  = Querschnittsfläche der Probe ( $m^2$ ).

- Reibungsfestigkeit der Kontaktfläche zwischen SVV und Salzring  $\sigma_R$ :

$$\sigma_a = \frac{F_R}{A_{\text{kontakt}}} = \frac{F_R}{\pi \cdot d \cdot l} \quad (7.7)$$

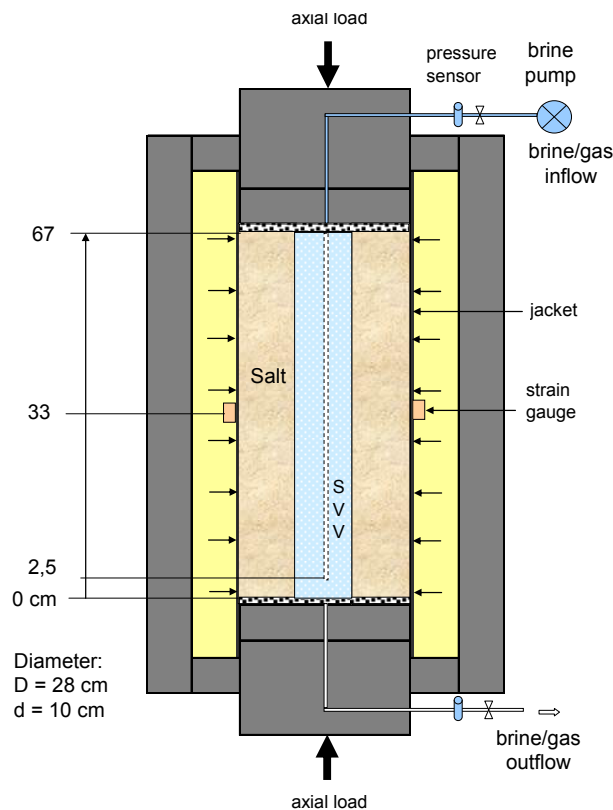
mit  $F_R$  = Reibungskraft an der Kontaktfläche,  $A_{\text{kontakt}}$  = Kontaktfläche zwischen Versatz und Salzring,  $d$  = Durchmesser des Bohrlochs und  $l$  = Länge des Bohrlochs.

## 7.5 Ergebnisse

### 7.5.1 Versuch I

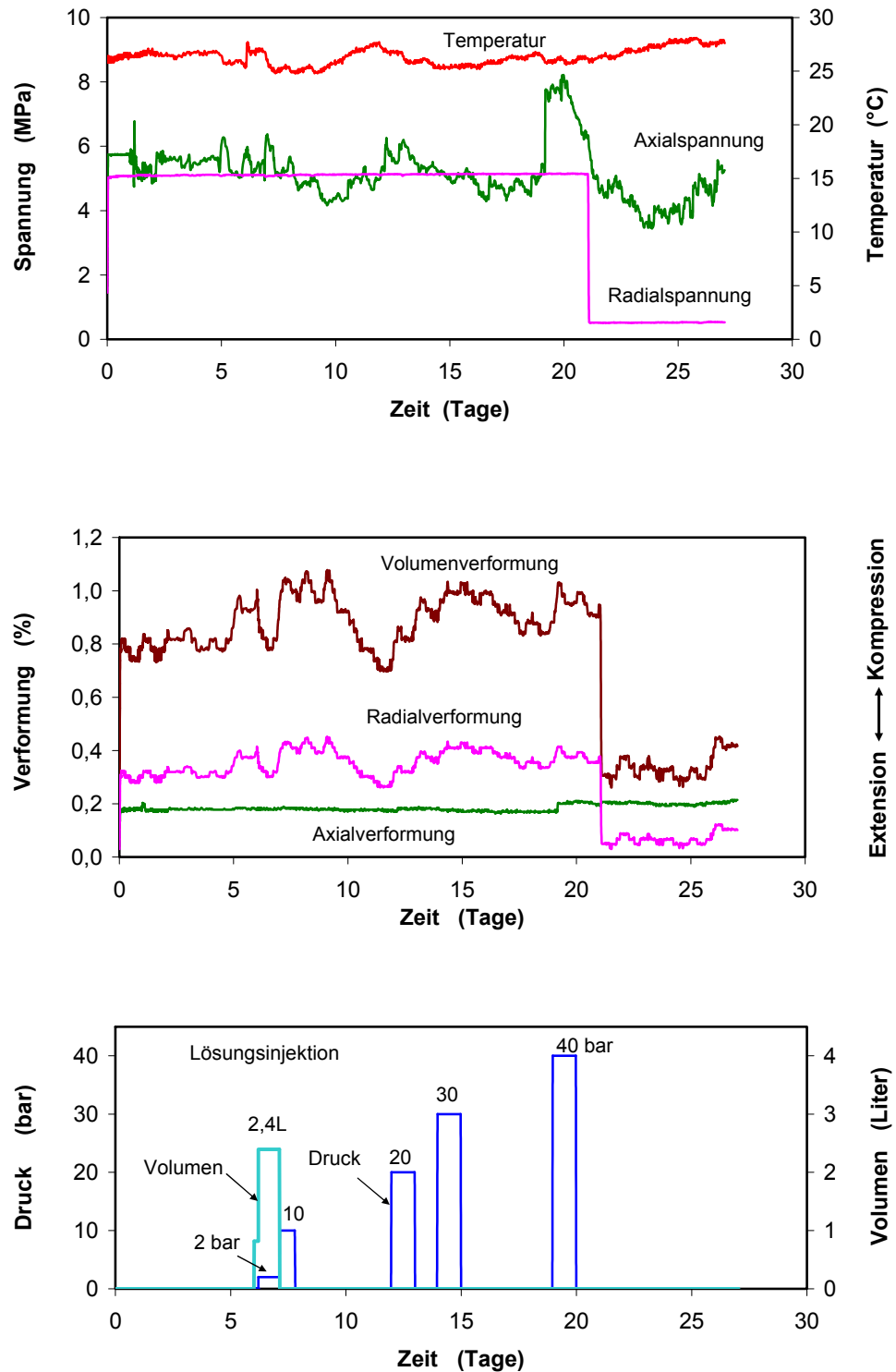
Vor dem Starten des C:HM-Projekts wurde im Oktober 2003 ein erster Vorversuch am großen Salzkern CHM0 (Abb. 7.1, links) mit Zentralbohrloch und eingefülltem SVV-Material von 49 % Porosität durchgeführt. Der gesamte Prüfkörper wurde bei einem Manteldruck von 5 MPa mit Q-Lauge durch ein zentriertes Stahlfilterrohr von oben nach unten bei erhöhten Injektionsdrücken von 2 bis zu 40 bar stufenweise geflutet. Dabei wurden jedoch die Reaktionen des SVVs wie der Druckaufbau und die Temperaturänderung nicht mitgemessen. Abb. 7.6 zeigt die schematische Darstellung der Testkonfiguration.





**Abb. 7.6** Prinzipdarstellung des Vorversuchs am großen SVV-Salz-Prüfkörper CHM0

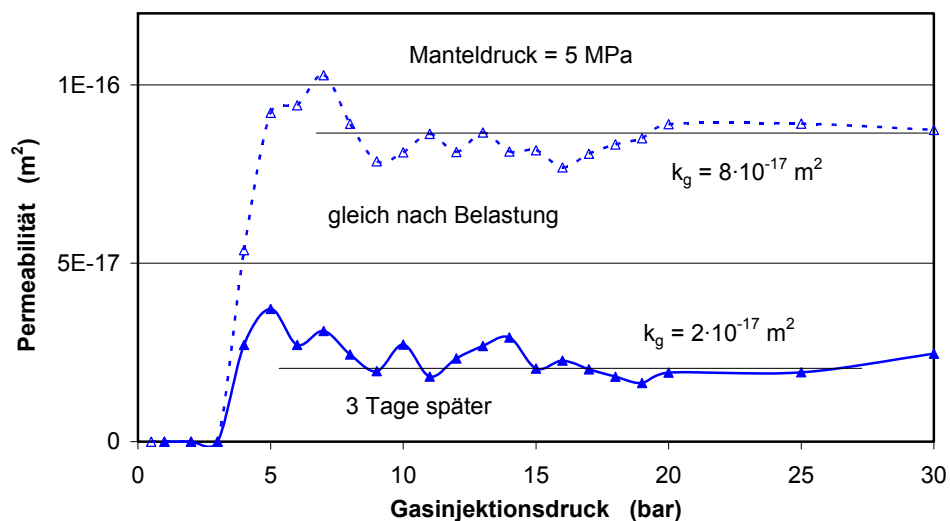
Die Messergebnisse von Spannungen, Verformungen und Drücken bzw. Menge der Lösungsinjektion sind in Abb. 7.7 über die Laufzeit des Versuchs zusammengefasst. Nach dem Probeneinbau wurden die Axialspannung bis zu  $\sigma_a = 5,7$  MPa und die Radialspannung bis zu  $\sigma_r = 5$  MPa erhöht. Anschließend wurde die erreichte Axialverformung von  $\varepsilon_a = 0,18$  % konstant eingehalten. Dabei wurden die Änderungen der Axialspannung bei  $\varepsilon_a = \text{konstant}$  und der Radialverformung bei  $\sigma_r = \text{konstant}$  über die Versuchszeit beobachtet. Nach den ersten 6 Tagen wurde der SVV-Versatz, wie oben beschrieben, mit Q-Lauge von oben durch das im Bohrloch installierte Filterrohr geflutet. Bei niedrigem Druck von 2 bar wurde insgesamt 2,4 Liter Q-Lauge in einer Zeit von ca. 10 Stunden in die Probe injiziert. Damit wurde das Porenvolumen (ca. 2,58 Liter) im SVV fast vollständig aufgesättigt. Obwohl die Ausflussleitung offen war, trat unten keine Lauge aus der Probe aus. Bei weiteren Druckerhöhungen bis zu 40 bar wurde auch kein Laugeneinfluss bzw. -ausfluss beobachtet. Während der Laugeninjektion schwankte die Temperatur im Bereich von 25 bis 27,5 °C. Diese Temperaturschwankung bewirkte eine deutliche Änderung der Axialspannung und Radialverformung. In der letzten Phase wurde die Radialspannung von 5 auf 0,5 MPa reduziert. Das führte zur starken Rückverformung in dieser Richtung.



**Abb. 7.7** Messergebnisse der Spannungen, Verformungen und Laugeninjektion beim C:HM-Vorversuch am SVV-Salz-Prüfkörper CHM0

Abschließend wurde der gesamte Prüfkörper entlastet und das Filterrohr mit Silikon abgedichtet, um Gaspermeabilität des SVV-Salz-Körpers zu messen und somit die

Dichtwirkung des ausreagierten SSV-Materials zu beurteilen. Die Permeabilitätsmessungen wurden unter einer hydrostatischen Belastung von 5 MPa und bei Gasinjektionsdrücken von 1 bis 30 bar durchgeführt. Die Gaspermeabilitätswerte, die gleich nach der mechanischen Beanspruchung und 3 Tage später bestimmt wurden, sind in Abb. 7.8 in Abhängigkeit des Injektionsdrucks dargestellt. Es zeigt sich, dass die Gaspermeabilität erst nach der Druckerhöhung auf 4 bar messbar ist und anschließend mit steigendem Injektionsdruck bis zu 5 – 7 bar zunimmt. Weitere Erhöhung des Injektionsdrucks hat keine deutliche Veränderung der Gaspermeabilität bewirkt. Daraus bilden sich ein Mittelwert von  $k_g = 8 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$  für die ersten Messungen gleich nach der Belastung und ein 4-fach niedrigerer Wert von  $k_g = 2 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$  nach 3 Tagen Kriechkompaktion.

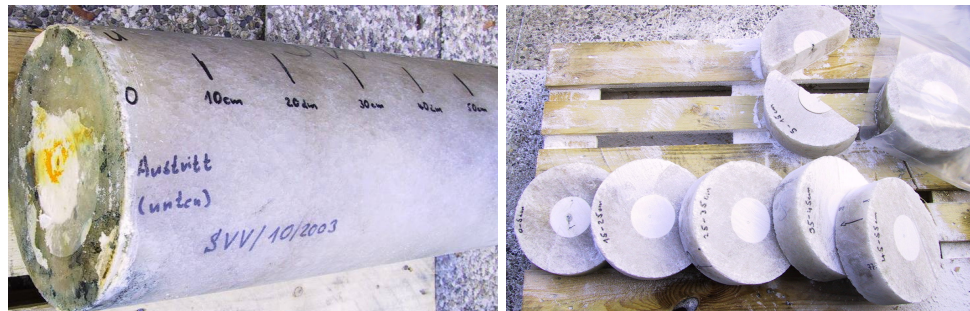


**Abb. 7.8** Ergebnisse der Permeabilitätsmessung am SVV-Salz-Prüfkörper CHM0

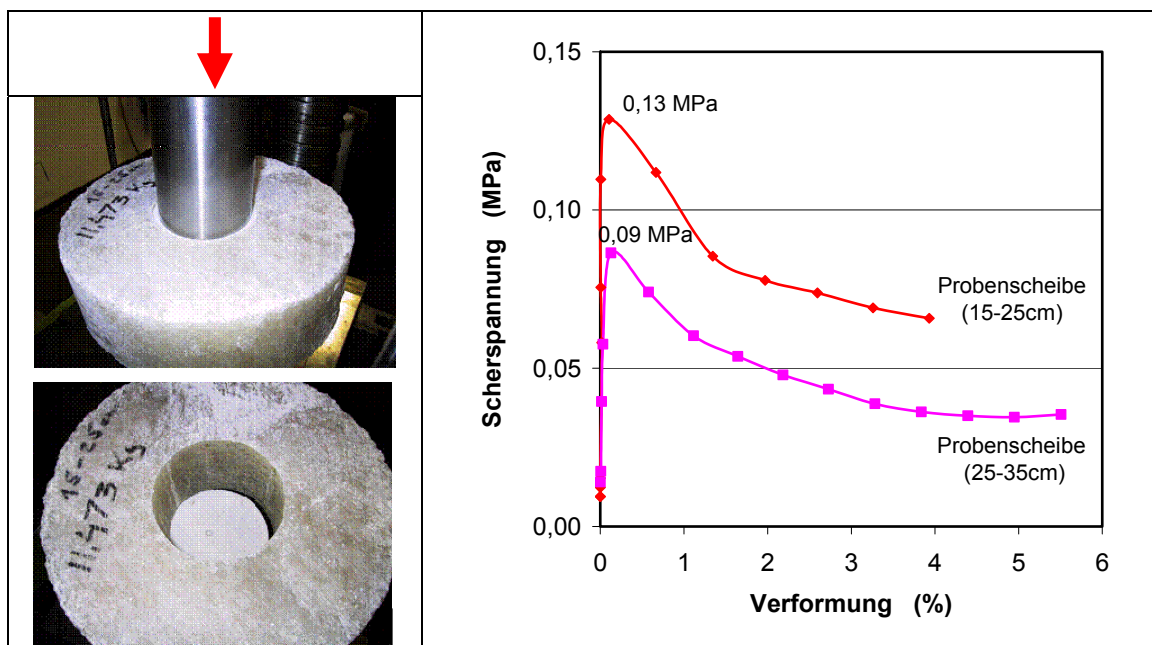
Zum Schluss wurde der Prüfkörper ausgebaut und abgeschnitten, um eventuelle Rissbildungen bzw. Wegsamkeit im SVV-Salz-Körper zu identifizieren. Von den Fotos der abgeschnittenen Scheiben (Abb. 7.9) lassen sich keine Risse bzw. Fließkanäle im gesamten Prüfkörper erkennen.

Zur Beurteilung der Integrität des SVV-Versatzes und Salzrings wurde die Reibungsfestigkeit über die Kontaktfläche durch Ausdruck des SVV-Körpers aus dem Bohrloch bestimmt. Abb. 7.10 zeigt die Scherspannungs-Verformungs-Kurven an zwei Proben-scheiben von der Probenunterseite von 15 cm bis 35 cm. Die Scherfestigkeit liegt zwi-

schen 0,09 und 0,13 MPa. Somit ist eine starke Integrität des SVV-Versatzes und Salzrings nachgewiesen.



**Abb. 7.9** Fotos des abgeschnittenen SVV-Salz-Prüfkörpers CHM0



**Abb. 7.10** Reibungsfestigkeit der Kontaktfläche zwischen SVV-Versatz und Salzring

## 7.5.2 Versuch II

Prüfkörper CHM1 (Abb. 7.1, Mitte) wurde für den zweiten Versuch eingesetzt. Der im Bohrloch eingefüllte SVV-Versatz hat eine Einbaudichte von  $1,45 \text{ g/cm}^3$  und eine Porosität von 45,4%. Die Position der im SVV installierten Messinstrumente und die Testkonfiguration sind in Abb. 7.3 dargestellt. Der vorgesehene Versuchsprozess (Kap. 7.3) wurde modifiziert. Die einzelnen Aktivitäten in den Testschritten sind in Tab. 7.3 zusammengestellt. Die Messergebnisse von Spannungen, Verformungen, Drücken

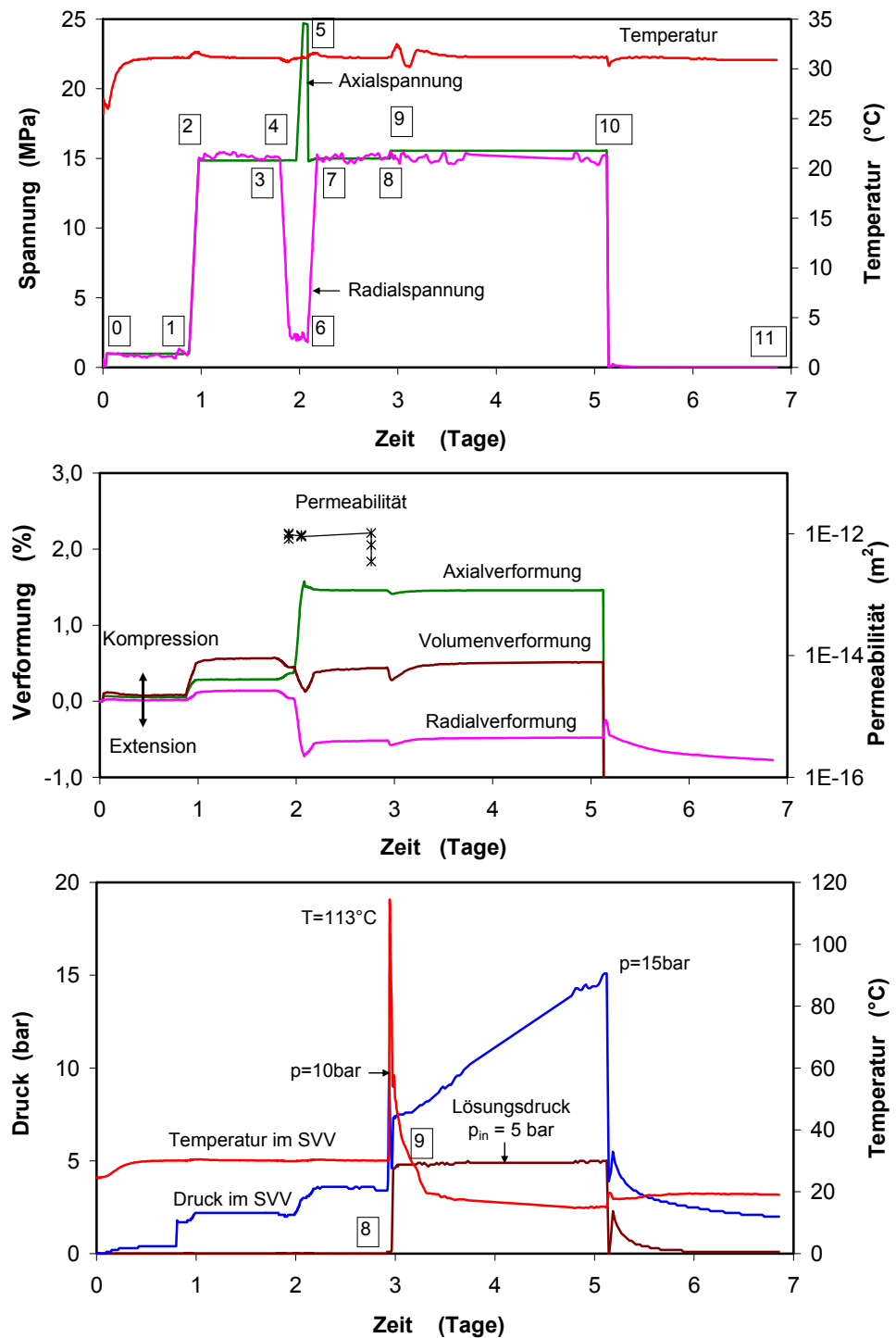
der Injektion von NaCl-Lösung, Druckaufbau und Temperaturänderung im SVV-Versatz sind in Abb. 7.11 über die Laufzeit des Versuchs zusammengefasst.

**Tab. 7.3** Verlauf des Simulationsversuchs II an SVV-Salz-Prüfkörper CHM1

| Versuchs-schritt | Startzeit [Tage] | Aktivität   |
|------------------|------------------|---|
| 0                | 0                | Probeneinbau und Vorlast auf $\Delta a = \Delta r = 1$ MPa, Temperatureinstellung auf 31°C                                  |
| 1                | 0,87             | Erhöhung der Spannungen mit Raten von 0,06 MPa/min bis zu $\Delta a = \Delta r = 15$ MPa                                    |
| 2                | 1,0              | Kriechkompaktion bei $\Delta a = \Delta r = 15$ MPa   |
| 3                | 1,8              | Reduzierung der Radialspannung $\Delta r$ mit Raten von 0,06 MPa/min bis zu $\Delta r = 2$ MPa, Permeabilitätsmessung kg    |
| 4                | 1,97             | Erhöhung der Axialspannung $\Delta a$ mit Raten von 0,06 MPa/min bis zu $\Delta a = 24,6$ MPa, Permeabilitätsmessung kg     |
| 5                | 2,0              | Reduzierung der Axialspannung $\Delta a$ mit Raten von 0,06 MPa/min bis zu $\Delta a = 15$ MPa                              |
| 6                | 2,1              | Erhöhung der Radialspannung $\Delta r$ mit Raten von 0,06 MPa/min bis zu $\Delta r = 15$ MPa                                |
| 7                | 2,2              | Kriechkompaktion bei $\Delta a = \Delta r = 15$ MPa, Permeabilitätsmessung kg   |
| 8                | 2,9              | Injektion von ges. NaCl-Lösung beim Druck $p_{in} = 0,2$ bar für $t = 0,9$ Stunden und $p_{in} = 5$ bar für $t = 2,36$ Tage |
| 9                | 3,0              | Dauerinjektion von Salzlösung beim Druck $p_{in} = 4,9$ bar   |
| 10               | 5,1              | Unkontrollierte Entlastung infolge der Rissbildung durch das Jackett, $\Delta a = \Delta r = 0$ MPa                         |
| 11               | 6,9              | Beenden und Ausbau des Versuchs   |

Die hydrostatische Belastung von 1 bis 15 MPa [1→2] führte zu einer Kompaktion des gesamten Prüfkörpers mit Verformungen von  $\varepsilon_a = 0,28$  %,  $\varepsilon_r = 0,12$  % und  $\varepsilon_v = 0,52$  %. Dabei baute sich ein Versatzdruck von ca. 2,2 bar auf. Die anschließende Permeabilitätsmessungen bei Gasinjektionsdrücken von 0,2, 0,4 und 0,6 bar zeigen einen Mittelwert von  $k_g = 1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$  für den gesamten Prüfkörper. Zur Erzeugung einer deutlichen Schädigung des Salzrings wurde eine deviatorische Belastung durch Reduzierung der Radialspannung bis zu 2 MPa und anschließende Erhöhung der Axialspannung bis zu 24,6 MPa gefahren [3→5]. Dabei wurde eine deutliche Deformation des gesamten Prüfkörpers mit einer Axialkompression von  $\Delta \varepsilon_a = 1,2$  %, Radialextension von  $\Delta \varepsilon_r = -0,8$  % und Volumenvergrößerung von  $\Delta \varepsilon_v = -0,4$  % beobachtet. Die folgende Erhöhung der Radialspannung und Reduzierung der Axialspannung zum ursprünglichen Niveau von 15 MPa [5→7] bewirkte keinen vollständigen Rückgang der Verformungen.

Diese deviatorische Belastung und Entlastung führte zu einem Versatzdruckaufbau bis zu 3,5 bar, aber zu keiner deutlichen Permeabilitätsänderung.



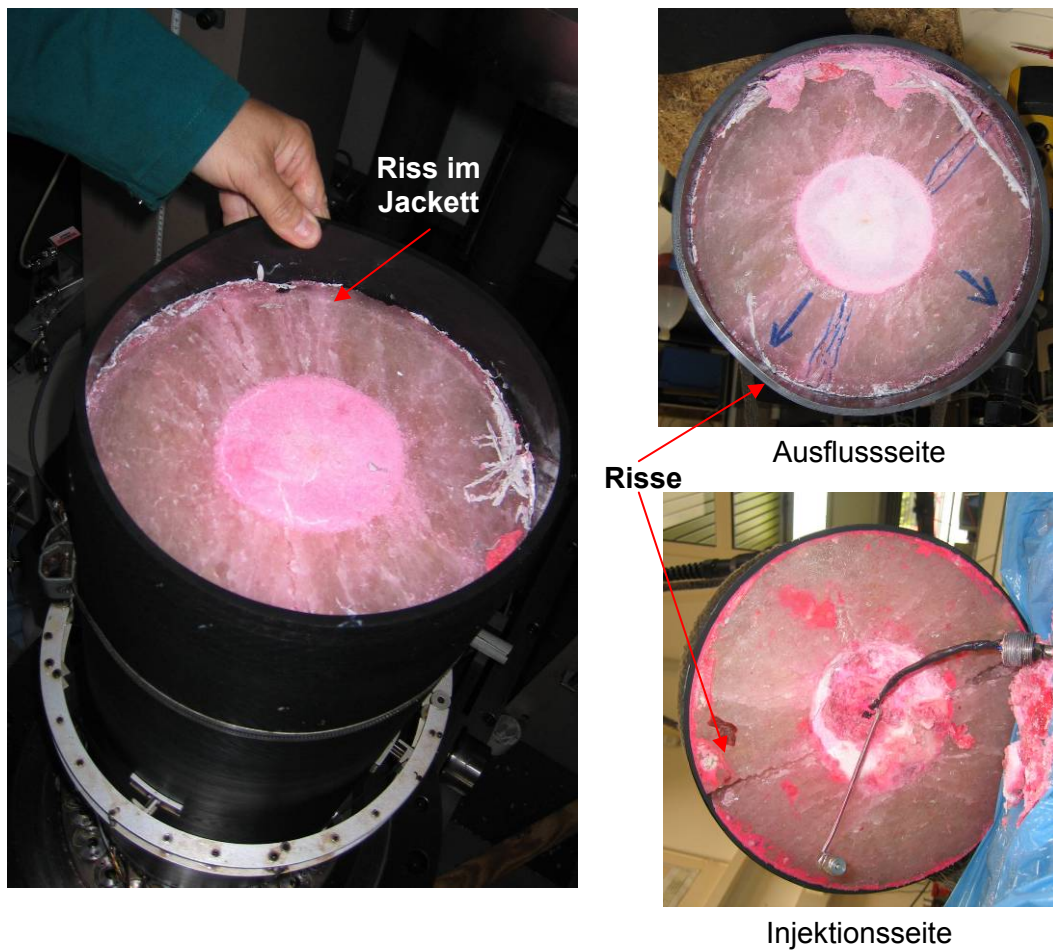
**Abb. 7.11** Messergebnisse der Spannungen, Verformungen, Laugeninjektionsdruck, Druckaufbau und Temperaturänderung im SVV beim Versuch CHM1

Nach Stabilisierung wurde angefärbte gesättigte NaCl-Lösung von der Unterseite beim Druck von  $p_{in} = 0,2$  bar für 0,9 Stunden und  $p_{in} = 5$  bar für 2,36 Tage in den Prüfkörper injiziert [8→9]. Chemische Umsetzungen des SVV-Materials mit der Salzlösung führten zu einer starken Temperaturerhöhung von 30 °C bis zu 113 °C und einem kurzzeitigen Versatzdruckaufbau von 3,5 bar bis zu 10 bar in 15 Minuten. Danach fiel die Temperatur schnell ab auf 55 °C in 5,6 Stunden und auf 20 °C in weiteren 8,5 Stunden. Dieser Wert ist 11 °C niedriger als die eingehaltene Randtemperatur von 31 °C. Eine weitere Reduzierung der Temperatur war viel langsamer und stabilisierte sich bei 15 °C. Der Versatzdruck nahm hingegen zuerst kurz auf 7,3 bar ab und dann kontinuierlich auf 15 bar über ca. 2 Tage zu. Die Injektion der Salzlösung bewirkte auch eine kurzzeitige Expansion des gesamten Prüfkörpers trotz der hohen Einspannung von 15 MPa. Diese expandierende Verformung wurde anschließend allmählich zurückgedrückt. Es ist zu betonen, dass kein Salzlösungsaustritt während der Injektion beobachtet wurde. Leider wurde die injizierte Lösungsmenge nicht gemessen.

Zwei Tage später war das Gummijackett an der oberen Kante des Salzrings gerissen und es drang Öl in die Probe ein. Dies verursachte eine unkontrollierte Entlastung [10→11]. Ohne Einspannung wurden der Versatzdruck, die Temperatur und der Lösungsdruck für ca. 2 Tage weiter beobachtet. Die Drücke fielen kontinuierlich ab, während die Temperatur bei 19,3 °C konstant blieb.

Abb. 7.12 zeigt die Fotos des ausgebauten Prüfkörpers. Neben einem Riss durch das Jackett sind auch ein paar Risse an den beiden Endflächen zu erkennen. Diese verlaufen entlang der scheinbaren Schichtung durch den Salzring. Vermutlich sind die Rissbildungen von der hohen deviatorischen Spannung ( $\sigma_a - \sigma_r = 22,6$  MPa) verursacht worden. Die Verfärbung im Salzring weist auf das Eindringen von Salzlösung in den Salzkörper hin. Außerdem kann man Fließkanäle im SVV identifizieren.





**Abb. 7.12** Fotos des ausgebauten SVV-Salz-Prüfkörpers CHM1



### 7.5.3 Versuch III

Im dritten Versuch wurde der Prüfkörper CHM2 von 64 cm Länge (Abb. 7.1, rechts) verwendet. Der im Bohrloch eingefüllte SVV-Versatz hat eine Einbaudichte von  $1,39 \text{ g/cm}^3$  und eine Porosität von 47,9 %. Die Position der im SVV installierten Messinstrumente und die Testkonfiguration sind in Abb. 7.3 dargestellt. Der vorgesehene Versuchsprozess (Kap. 7.3) wurde mit leichten Modifikationen durchgeführt. Die einzelnen Aktivitäten in den Testschritten sind in Tab. 7.4 zusammengestellt. Die Messergebnisse von Spannungen, Verformungen, Temperatur in der Zelle, Injektionsdrücken und -menge von NaCl-Lösung, Druckaufbau im SVV-Versatz, Gaspermeabilität vor und nach der Lösungsinjektion sind in Abb. 7.13, Abb. 7.14 und Abb. 7.16 über die Versuchslaufzeit zusammengefasst und werden wie folgt interpretiert (die Nummern beziehen sich auf die Arbeitsschritte im Versuchsprozess, wie in Kap. 7.3 dargestellt).

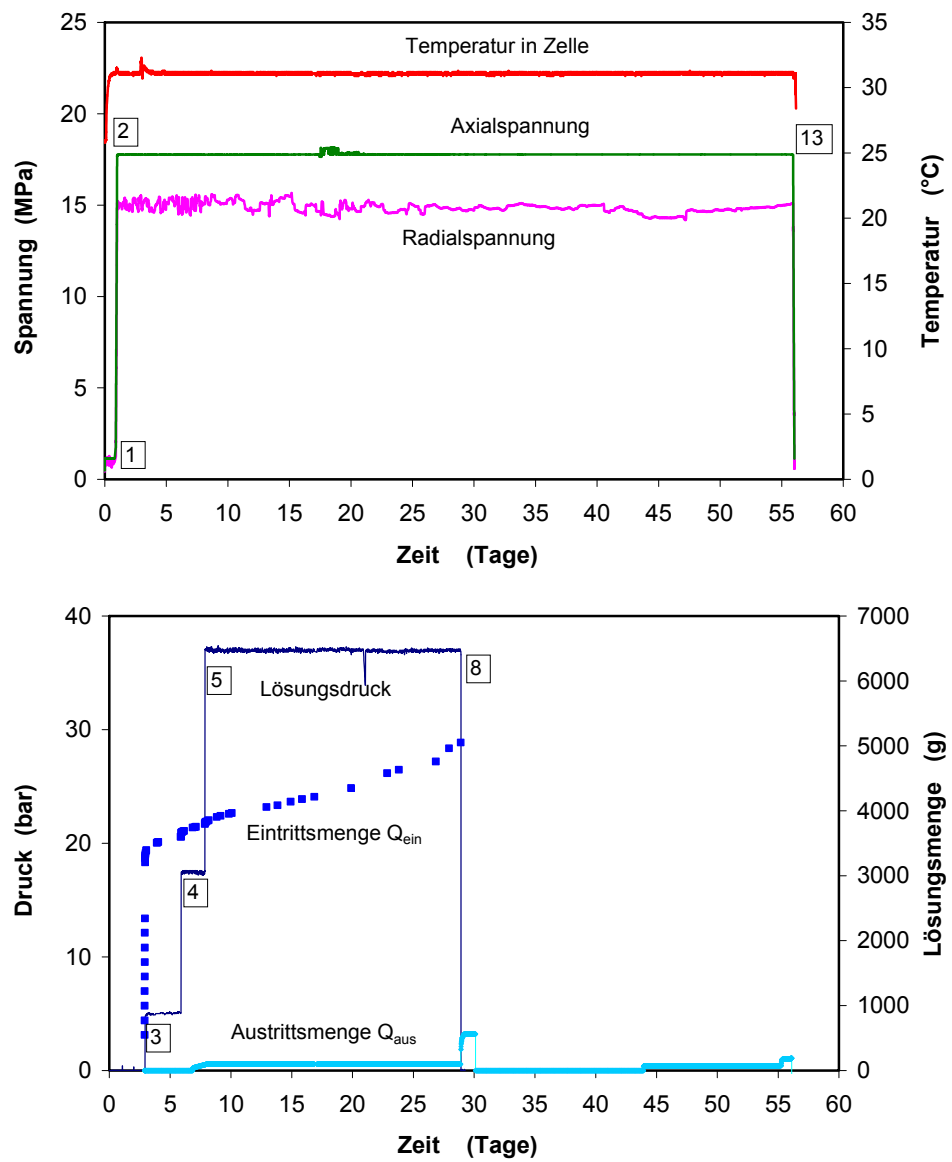
**Tab. 7.4** Verlauf des Simulationsversuchs III an SVV-Salz-Prüfkörper CHM2

| Versuchsschritt | Startzeit (Tage) | Aktivität  |
|-----------------|------------------|--|
| 0               | 0                | Probeneinbau und Vorlast auf $\sigma_a = \sigma_r = 1 \text{ MPa}$ , Temperatureinstellung auf $31 \text{ °C}$   |
| 1               | 0,88             | Erhöhung der Spannungen mit Rate von $0,1 \text{ MPa/min}$ bis zu $\sigma_a = 17,8 \text{ MPa}$ und $\sigma_r = 15 \text{ MPa}$                                  |
| 2               | 1,08             | Kriechkompaktion bei $\sigma_a = 17,8 \text{ MPa}$ , $\sigma_r = 15 \text{ MPa}$ , Permeabilitätsmessung kg bei Injektionsdruck $p_{in} = 0,2 - 0,6 \text{ bar}$ |
| 3               | 2,89             | NaCl-Injektion beim Druck $p_{in} = 5 \text{ bar}$   |
| 4               | 5,89             | NaCl-Injektion beim Druck $p_{in} = 17,3 \text{ bar}$  |
| 5               | 6,87             | NaCl-Injektion beim Druck $p_{in} = 37 \text{ bar}$  |
| 6               | 6,96             | Absperren der oberen Ausflussleitung   |
| 7               | 28,90            | Aufmachen der oberen Ausflussleitung, $p_{oben} = p_{atm} = 1 \text{ bar}$   |
| 8               | 28,91            | Reduzierung der Lösungsinjektionsdruck auf $p_{in} = p_{atm} = 1 \text{ bar}$ und Beenden der Lösungsinjektion   |
| 9               | 28,92            | Kriechkompaktion bei Schließen der oberen und unteren Leitungen  |
| 10              | 43,92            | Aufmachen der oberen und unteren Leitungen, $p_{oben} = p_{unten} = p_{atm} = 1 \text{ bar}$   |
| 11              | 43,96            | Permeabilitätsmessung kg bei Injektionsdruck $p_{in} = 1 \text{ bar}$  |
| 12              | 51,92            | Permeabilitätsmessung kg bei Injektionsdruck $p_{in} = 10 \text{ bar}$   |
| 13              | 55,91            | Entlastung und beenden des Versuchs  |
| 14              | 79,0             | Nachuntersuchungen   |

1. **Mechanische Beanspruchung [0→2]:** Der gesamte SVV-Salz-Prüfkörper wurde mit einer Belastungsgeschwindigkeit von 0,1 MPa/min von 1 MPa auf  $\sigma_a = 17,8$  MPa und  $\sigma_r = 15$  MPa beansprucht. Dabei wurden die Axialverformung von  $\varepsilon_a = 0,28$  %, Radialverformung von  $\varepsilon_r = 0,13$  % und Volumenverformung von  $\varepsilon_v = 0,54$  % gemessen. Die äußeren Drücke bewirkten einen leichten Druckaufbau im verfüllten Bohrloch von 1,7 bar auf 3,2 bar. Nach der Stabilisierung über einen Tag erfolgten die ersten Gaspermeabilitätsmessungen bei Injektion von Stickstoff an der unteren Seite des Prüfkörpers unter konstantem Druck von 0,2, 0,4 und 0,6 bar. Die gemessene Gaspermeabilität für den gesamte SVV-Salz-Prüfkörper beträgt  $k_g = 1 \cdot 10^{-12}$  m<sup>2</sup>. Es ist darauf hinzuweisen, dass aufgrund einer Störung des Testsystems die Radialspannung nicht ordentlich gesteuert werden konnte und in einem relativ großen Streubereich von  $\pm 0,4$  MPa schwankte.
2. **Salzlösungsflutung [3→8]:** Unter der mechanischen Beanspruchung wird rot eingefärbte gesättigte NaCl-Lösung von der unteren Seite mit einer HPLC-Pumpe bei Drücken von 5, 17 und 37 bar stufenweise in den SVV-Versatz injiziert. Bei der ersten Injektion [3] mit 5 bar drang die Salzlösung von ca. 3,6 kg in die Probe schnell ein. Einen Tag später wurde Ausfluss von Salzlösung an der anderen Seite beobachtet. Die Lösungsinjektion führte zu einem schnellen Druckaufbau im SVV von 3,6 bar bis zu 14,5 bar. Kurz danach fiel der Versatzdruck wieder schnell ab. Infolge des frühen Ausfalls des Temperatursensors PT100 konnte leider die Temperaturänderung im SVV nicht gemessen werden. Jedoch lässt sich eine starke Temperaturerhöhung im SVV wie die Beobachtung beim Versuch II annehmen. Die durch chemisch-mineralogische Reaktion induzierte Temperatur- und Innendruckerhöhung bewirkte auch eine kurzzeitige Expansion des gesamten Prüfkörpers trotz der hohen Einspannung. Die extensive Verformung betrug bei  $\Delta\varepsilon_a = 0,05$  %,  $\Delta\varepsilon_r = 0,04$  % und  $\Delta\varepsilon_v = 0,13$  %. Danach deformierte der Prüfkörper schnell zurück. Bei der zweiten Lösungsinjektion [4] beim Druck von 17 bar wurde nur geringfügige Lösungsmenge in die Probe injiziert. Nach Erhöhung des Injektionsdrucks auf 37 bar [5] wurde die Ausflussleitung an der oberen Seite geschlossen, um eine homogene Aufsättigung der Salzlösung im SVV-Versatz zu erreichen. Während der dritten Injektionsphase von 21 Tagen nahm die Eintrittsmenge der Salzlösung mit einer Rate von ca. 48 g/d ständig zu. Der im Druckkissen gemessene Versatzdruck war mit dem Lösungsinjektionsdruck identisch. Das weist auf eine direkte hydraulische Verbindung von Lösungseintrittsgang zum Druckkissen hin. Das wurde wahrscheinlich von einer Umläufigkeit entlang der Ölleitung zum Druckkissen verursacht. Auf der anderen Seite baute sich der Druck kontinu-

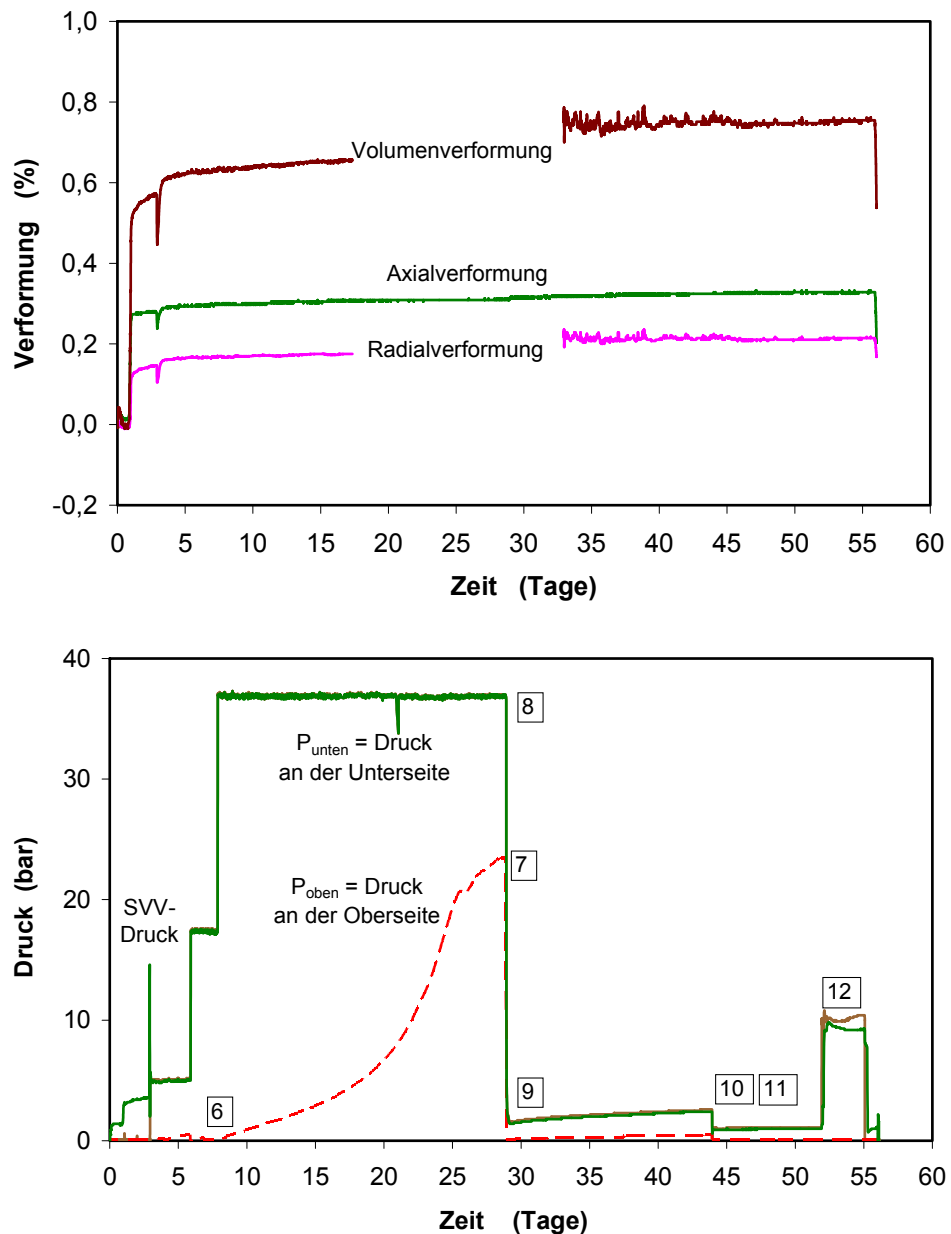
ierlich bis zu 23 bar auf. Das zeigt das Erreichen einer vollständigen Aufsättigung des Versatzes. Über die Lösungsinjektionsphase wurde eine allmähliche Kompression des gesamten Prüfkörpers beobachtet. Die in den ersten 10 Tagen ermittelte Verformungsgeschwindigkeit beträgt bei  $d\varepsilon_a/dt = 1,1 \cdot 10^{-3} \text{ \%/d}$ ,  $d\varepsilon_r/dt = 5,0 \cdot 10^{-4} \text{ \%/d}$  und  $d\varepsilon_v/dt = 2,1 \cdot 10^{-3} \text{ \%/d}$ . Aufgrund eines Messtechnikproblems fehlen die Daten für die Radial- bzw. Volumenverformung in der Zeit von 17,3 bis 33,3 Tagen. Am Ende der Injektionsphase wurde der Injektionsdruck auf Null reduziert und die obere Ausflussleitung aufgemacht. Durch Entleerung der im Leitungssystem gebliebenen Salzlösung erhöhte sich die Lösungsaustrittsmenge von 97,5 g auf 562,0 g.

3. **Kriechkompaktion [9→10]:** Nach Schließen der oberen und unteren Leitungen wurde eine Kriechkompaktionsphase für weitere zwei Wochen gefahren. Dabei wurde eine leichte Steigerung des Versatzdrucks von 1,5 bar bis 2,3 bar beobachtet. Die Verformungsrate änderte sich nicht deutlich.
4. **Permeabilitätsmessung [11→12]:** Zur Beurteilung der Dichtwirkung des SVV-Versatzes wurde die Gaspermeabilität des integralen Verschlussystems nach der Lösungsflutung wieder gemessen. Bei einem Injektionsdruck von 1 bar wurde am Anfang eine Gaspermeabilität von  $1 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$  ermittelt. Interessant ist es, dass sich die Permeabilität in 5 Tagen bis zu  $2 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2$  stark reduzierte. Dieser Wert ist in neun Größenordnungen niedriger als den Anfangswert vor der Lösungsflutung. Außerdem ist es deutlich, dass das integrale Verschlussystem nach der Lösungsflutung so dicht wie bei ungestörtem Feststeinsalz geworden ist. Eine weitere Erhöhung des Gasdrucks auf ca. 10 bar hatte wahrscheinlich Mikrorisse geöffnet. Dadurch erhöhte sich die Permeabilität auf  $3 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ .
5. **Entlastung [13]:** Nach der Permeabilitätsmessung wurden der Gasdruck und anschließend die Spannungen auf Null reduziert. Die Entlastung bewirkte elastische Rückverformungen von  $\Delta\varepsilon_a = -0,12 \text{ \%}$ ,  $\Delta\varepsilon_r = -0,04 \text{ \%}$  und  $\Delta\varepsilon_v = -0,20 \text{ \%}$ . Der im Druckkissen gemessene Versatzdruck nahm von 9,2 bis 1,0 bar ab. Die Dichtigkeit des Gummidruckkissens wurde am Ende des Versuchs durch Ölinjektion nachgeprüft und bestätigt.



**Abb. 7.13** Versuchsergebnisse CHM2

Oben: Spannungsänderungen    Unten: Entwicklung des Lösungsdrucks



**Abb. 7.14** Versuchsergebnisse CHM2

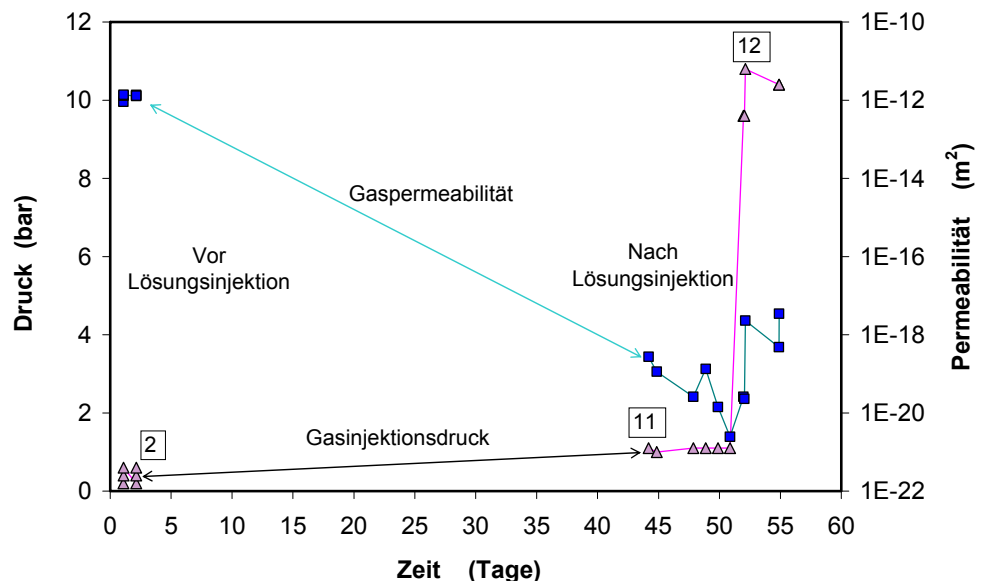
Oben: Verformungen des Bohrkerns Unten: Entwicklung des Gesamtdrucks

6. **Nachuntersuchungen [14]:** Nach dem Versuchsausbau und einer Entspannungszeit von 23 Tagen wurde der Prüfkörper von der Oberseite an in 4 Scheiben mit ca. 10 cm Dicke abgeschnitten. Abb. 7.17 zeigt die Fotos der abgeschnittenen Scheiben. An der äußeren Oberfläche erscheinen Mikrorisse entlang der Korngrenzen und parallel zur Schichtung. Eine Vertiefung der Risse in den Salzring ist an den abgeschnittenen Scheiben nicht erkennbar. An den Scheiben ist ein sehr dichter Kontakt zwischen SVV und Salzring festzustellen. Zur Beurteilung der Integrität zwischen SVV und Salzring wird der Versatzkörper aus jeder Scheibe heraus gedrückt und die Reibungskraft gemessen (Abb. 7.20). Die Messdaten sind in Tab.

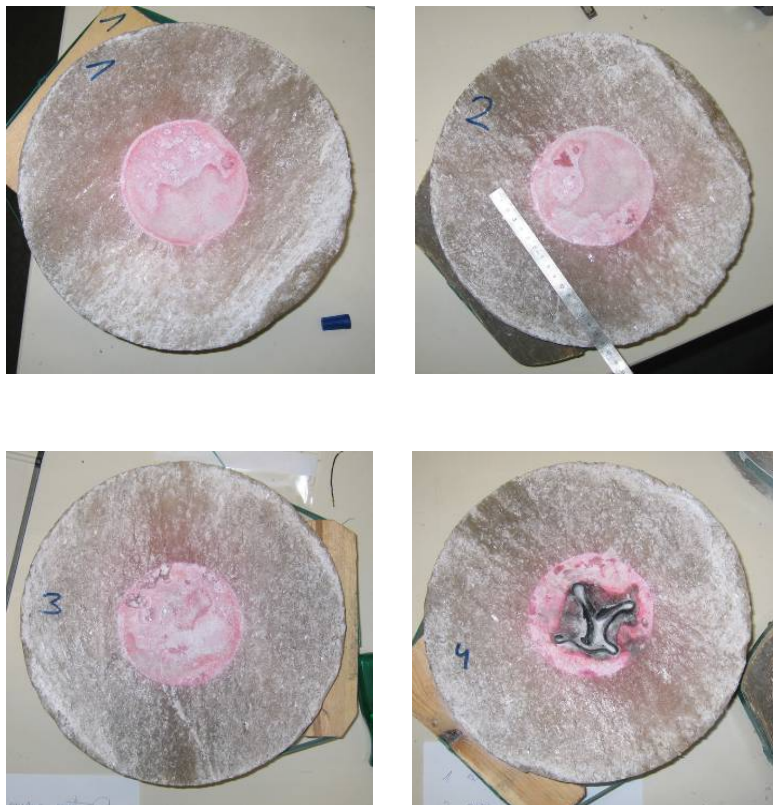
7.4 zusammengestellt. Die Ergebnisse zeigen eine hohe Reibungsfestigkeit der Kontaktfläche zwischen SVV und Salzring. Die Kontaktfestigkeit erreichte den maximalen Wert von 1,6 MPa im unteren Bereich und nahm mit der Entfernung zum Eintrittsgang der Salzlösung leicht ab.



**Abb. 7.15** Der ausgebaute SVV-Salzprüfkörper CHM2



**Abb. 7.16** Versuchsergebnisse CHM2. Ermittlung der Gaspermeabilität

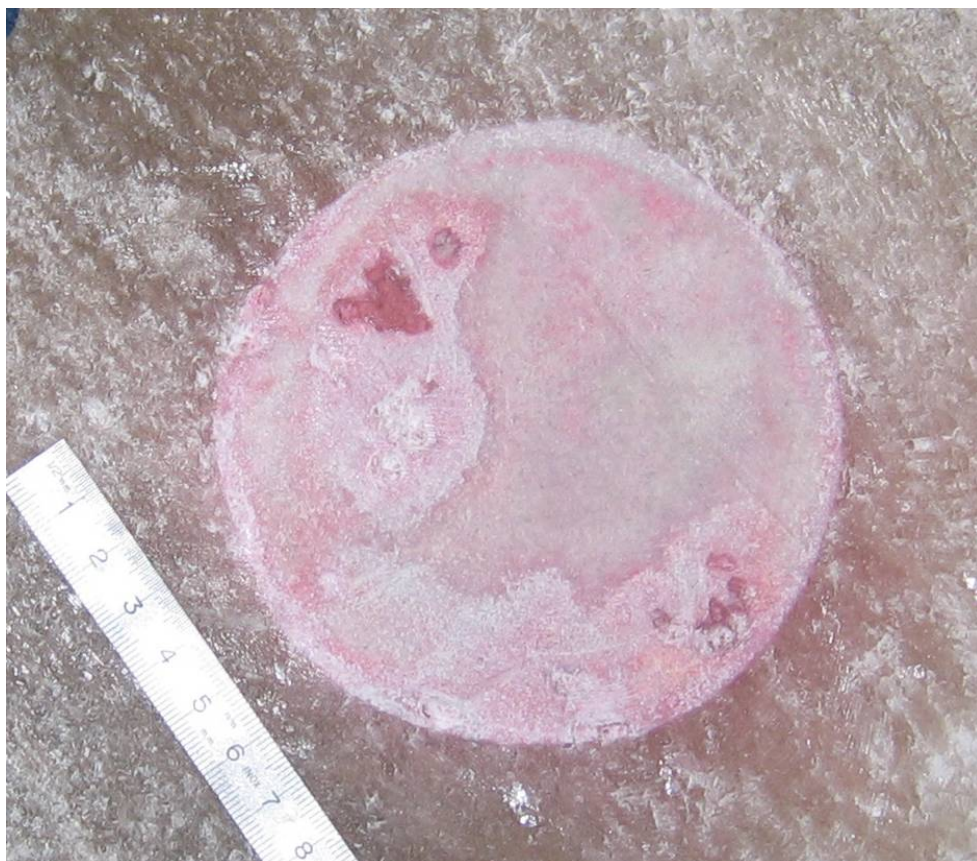


**Abb. 7.17** Der SVV-Salzprüfkörper in Segmente zerteilt. Segment 4 war unten (Einströmseite); dort ist die (zerstörte) Druckblase zu erkennen





**Abb. 7.18** Die zerstörte Druckblase als Detailansicht



**Abb. 7.19** Ein Segment des SVV-Salzprüfkörpers in der Detailansicht

Eine visuelle Begutachtung aller Segmente ergab, dass sich keine präferentiellen Fließpfade gebildet hatten.



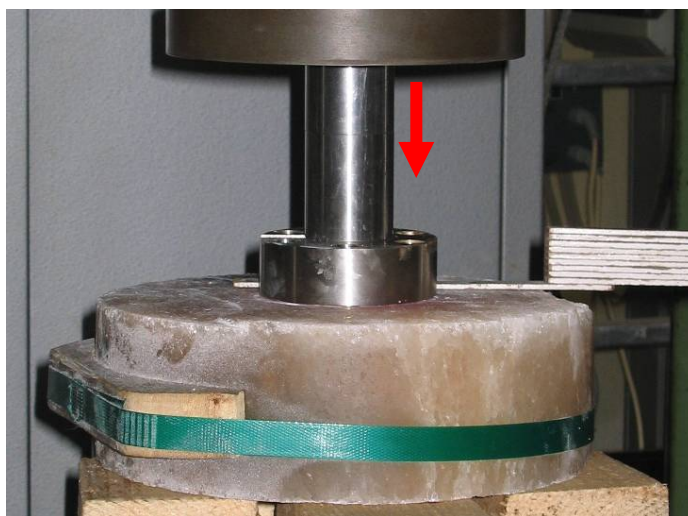
**Tab. 7.5** Reibungsfestigkeit der Kontaktfläche zwischen SVV und Salzring

| Proben-Scheibe | Länge [m] | Innendurchmesser [m] | Reibungsfläche [m <sup>2</sup> ] | Reibungsfestigkeit [MPa] |
|----------------|-----------|----------------------|----------------------------------|--------------------------|
| 1 (oben)       | 0,099     | 0,1                  | 0,314                            | 0,57                     |
| 2              | 0,093     | 0,1                  | 0,628                            | 1,04                     |
| 3              | 0,092     | 0,1                  | 0,942                            | 1,23                     |
| 4              | 0,093     | 0,1                  | 1,256                            | 1,56                     |
| 5 (unten)      | 0,263     | 0,1                  |                                  |                          |

Man erkennt, dass die Reibungsfestigkeit von der Einstromseite (unten) nach oben hin abnimmt. Dies erscheint plausibel vor dem Hintergrund, dass das SVV-Material an der Einstromseite mit der meisten Lösung in Kontakt gekommen ist, bzw. dass die Lösung an der Einstromseite im Vergleich zur Austrittseite den höheren Wassergehalt aufwies.

#### 7.5.4 Röntgendiffraktometrische Untersuchung

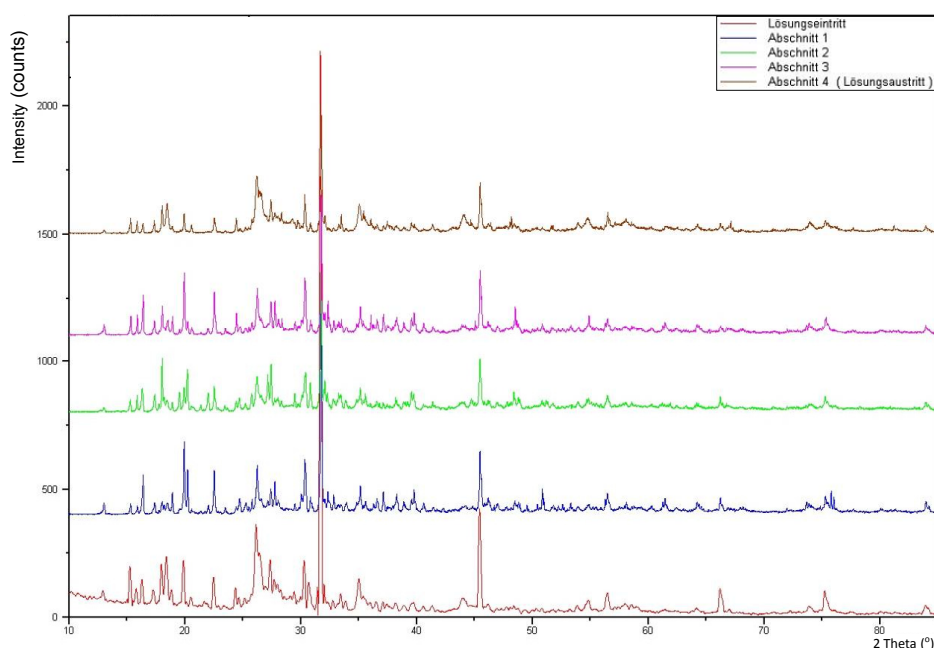
Um Aufschluss über die Neubildung von Mineralphasen im durchströmten Bereich der Bohrkerne zu erlangen, wurde der Bohrkern nach dem Versuch in fünf Segmente aufgeteilt. Im Bereich des Laugenzuflusses war dieses Segment dicker, da die (metallische) Zuleitung der Druckblase nicht durchgesägt werden konnte. Aus den entstandenen Scheiben wurde das ausreagierte SVV-Material herausgedrückt (s. Abb. 7.20) und röntgendiffraktometrisch untersucht.



**Abb. 7.20** Messung der Kontaktfestigkeit zwischen SVV-Versatz und Salzring

**Tab. 7.6** Röntgendiffraktometrisch nachgewiesene Mineralphasen im SVV. Zahlen kennzeichnen mol Wasser pro Formeleinheit  $\text{MgSO}_4$

| Position | Halit | SVV-0 | SVV-1 | SVV-4 | SVV-5 | SVV-6 |
|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 4        | X     | X     | X     | X     | X     | X     |
| 3        | X     |       | X     | X     | X     | X     |
| 2        | X     |       |       | X     | X     | X     |
| 1        | X     | X     |       | X     | X     | X     |
| Zustrom  | X     | X     |       | X     | X     |       |



**Abb. 7.21** Röntgendiffraktogramme aller fünf untersuchten Abschnitte

## 7.6 Diskussion und Zusammenfassung

Ein Bohrlochverschluss in Salz wurde im Labor an gelochten Großsalzzylinder mit eingefülltem SVV-Material unter relevanten in-situ-Bedingungen untersucht. Aus den Ergebnissen der gekoppelten C:HM-Simulationsversuche lassen sich folgende Schlussfolgerungen ableiten:

- Die Flutung des SVV-Versatzes durch Salzlösung initialisiert chemisch-mineralogische Reaktionen, wobei (im Fall der Flutung mit gesättigter NaCl-Lösung) für kurze Zeit eine schnelle Erhöhung der Temperatur bis zu 113 °C und ein Aufbau des Kristallisationsdrucks bis zu 1,5 MPa beobachtet wurden.

- Die gebildeten Kristalle schließen die Poren im SVV-Versatz, so dass die integralen SVV-Salz-Prüfkörper mit sehr niedrigen Gaspermeabilitäten bis zu  $10^{-21} \text{ m}^2$  wie beim Feststeinsalz praktisch gegen Gas und Salzlösung undurchlässig geworden sind.
- Die Kristallisation im SVV-Material und der resultierende Druckaufbau gegen den umschließenden Salzring bewirken einen starken Kontakt zwischen SVV-Versatz und Salzring mit hoher Reibungsfestigkeit bis zu 1,6 MPa.



## 8 Simulation des Bohrkernversuchs

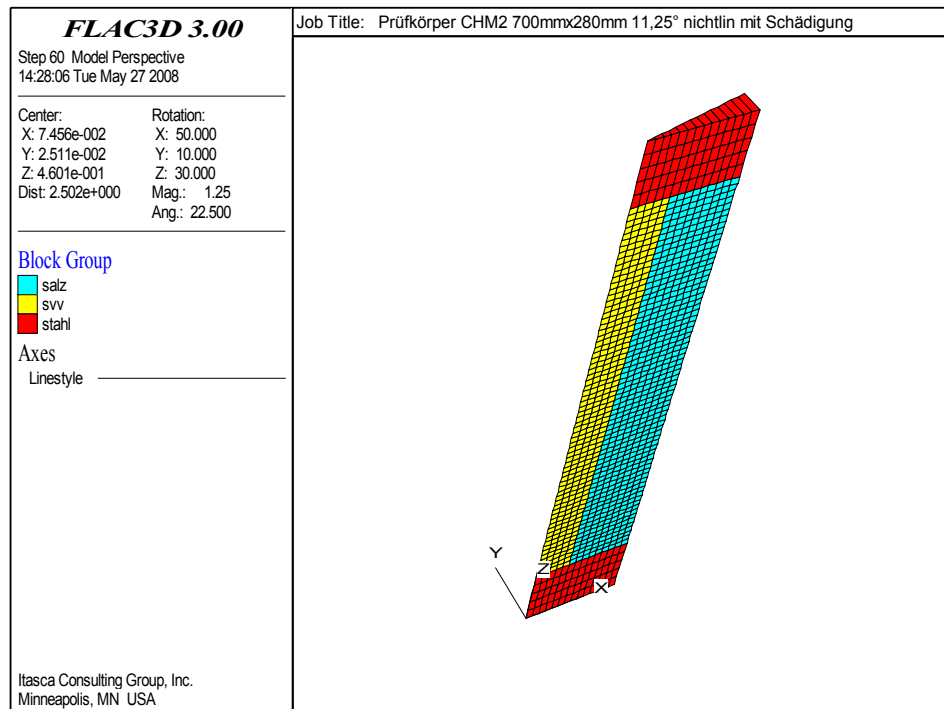
In den folgenden Kapiteln werden die Ergebnisse der numerischen Simulationen zu den axial gelochten Großbohrkernen vorgestellt. Dazu werden die verwendeten geometrischen und physikalischen Abstraktionen erläutert sowie die Berechnungsergebnisse präsentiert und im Vergleich zu den Messwerten an den Laborversuchen diskutiert und bewertet. Für die physikalische Modellierung des Steinsalz-Materialverhaltens werden die Stoffmodelle LUBBY1 [LUX 84], LUBBY2 [LUX 84] und Hou/Lux [EBZ 06] verwendet.

Die Versuchsrandbedingungen und Versuchsergebnisse sind dem Laborbericht der GRS entnommen (Kap. 7).

### 8.1 Modellbeschreibung

*Geometrisches Modell:* Die Versuche CHM1 und CHM2 wurden der rechnerischen Simulation zugrunde gelegt. Für beide Versuche wurde bis auf die Prüfkörperlänge dasselbe geometrische Modell verwendet. Dabei handelt es sich um einen zylindrischen Prüfkörper mit einer Höhe von  $h = 64$  bzw.  $70$  cm und einem Durchmesser von  $d = 28$  cm mit einer axialen Bohrung von  $d_i = 10$  cm Durchmesser (Abb. 8.1). In dem Modell wird die Rotationssymmetrie des Prüfkörpers und der Belastung genutzt und zur Reduktion des Berechnungsaufwandes nur ein Zylindersegment mit einem Radiuswinkel von  $\varphi = 11,25^\circ$  modelliert (Minimalisierung der Anzahl an Zonen). Die im Versuch ober- und unterhalb des Prüfkörpers befindlichen Stahlplatten (Druckplatten) mit einer Dicke von  $h_{\text{Stahl}} = 10$  cm und mit einem Durchmesser von ebenfalls  $d = 28$  cm sind im Modell berücksichtigt worden, um die Endflächenreibung zu erfassen.

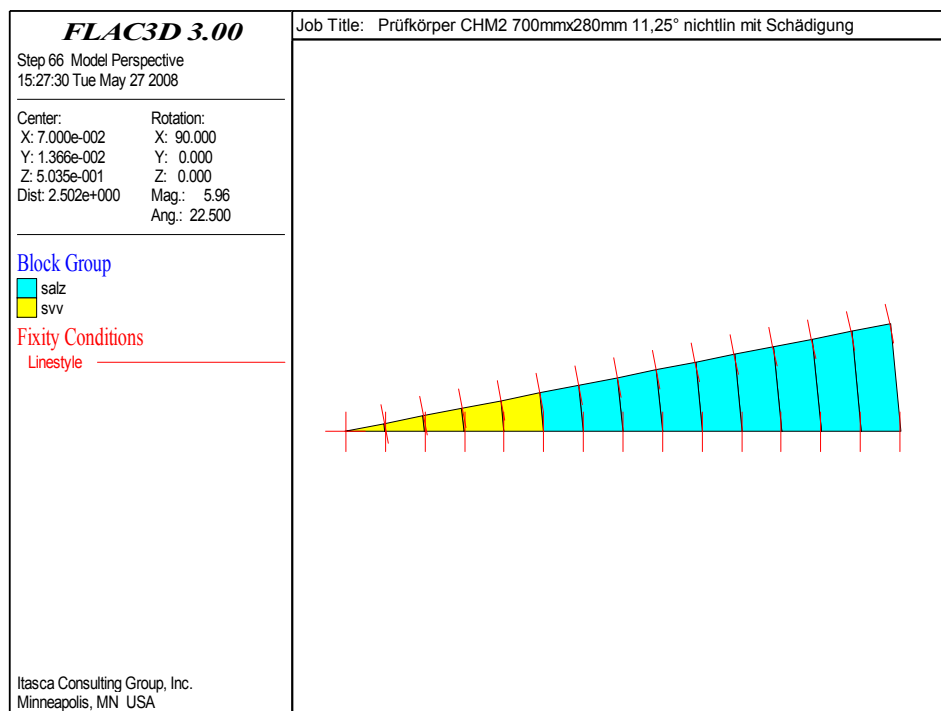
Die Position des geometrischen Modells im Polarkoordinatensystem wurde so gewählt, dass die z-Achse mit der Rotationsachse des Prüfkörpers zusammenfällt und die Unterkante der unteren Stahlplatte im Ursprung liegt, so dass sich das Modell im positiven Bereich dieses Koordinatensystems befindet.



**Abb. 8.1** Verwendetes geometrisches Modell mit den verschiedenen Materialgruppen

*Geometrische Randbedingungen:* Für die Berechnungen sind folgende geometrische Randbedingungen vorgegeben worden (Abb. 8.2):

- Keine Verschiebungen entlang der z-Achse in x und y-Richtung
- Keine Verschiebung des Koordinatenursprungs
- Keine Verschiebung entlang der x-Achse in x und y-Richtung
- Keine Verschiebung in tangentialer Richtung auf den Seitenflächen des Segments
- Keine Verschiebung der unteren Randfläche der unteren Stahlplatte in z-Richtung



**Abb. 8.2** Geometrische Randbedingungen des Modells in x-y-Richtung (unverschiebliche Lagerung)

*Physikalische Modellierung und Materialkennwerte:* Das Berechnungsmodell besteht aus den drei Materialtypen Steinsalz, SVV und Stahl. Die verwendeten Materialkennwerte sind in Tab. 8.1 aufgelistet. Das Steinsalz wird mit den Stoffmodellen Hooke, LUBBY1 und HOU/LUX-phs modelliert, während für die Stahlplatten ein linear-elastisches Materialverhalten angenommen wird. Die Materialparameter werden entsprechend Tab. 8.1, Tab. 8.2 und Tab. 8.3 zugrunde gelegt. Für die Modellierung des SVV werden die Stoffmodelle Hooke bzw. Korthaus/Hein verwendet.

**Tab. 8.1** Materialkennwerte für das Hooke Stoffmodell für trockenen SVV, Asse-Steinsalz und Stahl

| Parameter             | Steinsalz | Stahl  | SVV               |
|-----------------------|-----------|--------|-------------------|
| E-Modul [MPa]         | 25000     | 210000 | 100 <sup>1)</sup> |
| Poissonzahl $\nu$ [1] | 0,27      | 0,3    | 0,3 <sup>1)</sup> |

<sup>1)</sup> geschätzte Werte für den wasserfreien, noch nicht ausgehärteten SVV; die in Tab. 3.6 angegebenen Werte beziehen sich auf ausreagierten SVV

**Tab. 8.2** Materialkennwerte für das Stoffmodell LUBBY1 für Asse-Steinsalz ([LUX 84])

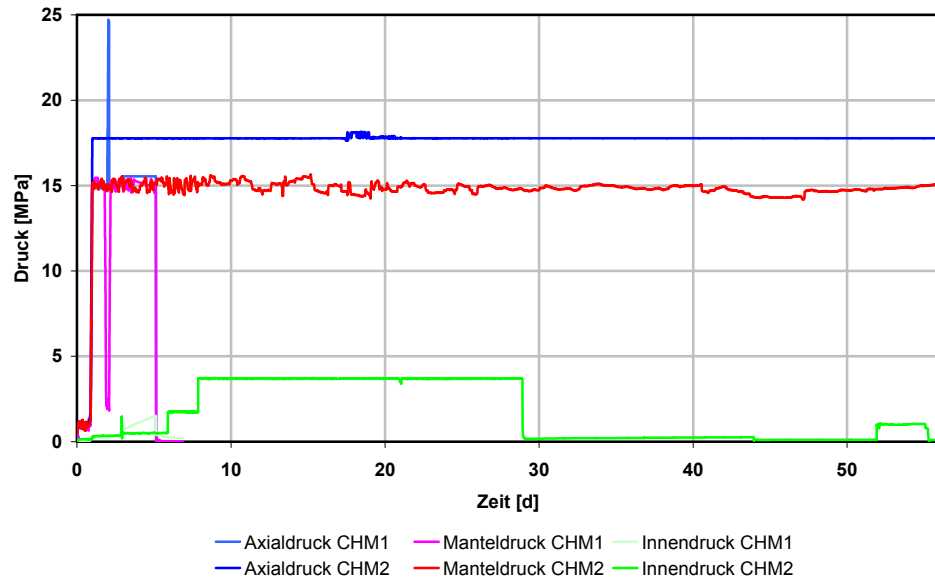
| Parameter       | Steinsalz         |
|-----------------|-------------------|
| Parameter n [1] | 3,92              |
| Parameter B [1] | $1,35 \cdot 10^9$ |

**Tab. 8.3** Materialkennwerte für das Stoffmodell HOU/LUX-phs für Asse-Steinsalz [EBZ 06]

| Parametersatz Asse [EBZ 06] |       |                   |             |       |                      |
|-----------------------------|-------|-------------------|-------------|-------|----------------------|
| HOU/LUX-ODS                 |       |                   | HOU/LUX-MDS |       |                      |
| $\bar{G}_k^*$               | MPa   | $5,08 \cdot 10^4$ | $a_0$       | -     | 0,08                 |
| $\bar{\eta}_k^*$            | MPa·d | $8,94 \cdot 10^4$ | $a_1$       | -     | 6,0                  |
| $\bar{\eta}_m^*$            | MPa·d | $4,06 \cdot 10^7$ | $a_2$       | -     | 4,0                  |
| $K_1$                       | 1/MPa | -0,191            | $a_3$       | 1/d   | $2,0 \cdot 10^{-10}$ |
| $K_2$                       | 1/MPa | -0,168            | $a_4$       | -     | 0,855                |
| $M$                         | 1/MPa | -0,247            | $a_5$       | 1/MPa | 0,04                 |
| $I$                         | 1/K   | 0                 | $a_6$       | MPa   | 53,0                 |
| $T$                         | K     | 295               | $a_7$       | MPa   | 27,6                 |
|                             |       |                   | $a_8$       | 1/MPa | 0,25                 |
| $\bar{G}_{kE}^*$            | MPa   | $5,08 \cdot 10^4$ | $a_9$       | -     | 1,0                  |
| $k_{1E}$                    | 1/MPa | -0,191            | $a_{10}$    | 1/MPa | 0,25                 |
| $l_{1E}$                    | 1/K   | -                 | $fc1$       | MPa   | 13,0                 |
|                             |       |                   | $fc2$       | -     | 4,0                  |
|                             |       |                   | $fs1$       | MPa d | 12263                |
|                             |       |                   | $fs2$       | -     | 1,5                  |
|                             |       |                   | $fh$        | d     | 3200                 |
|                             |       |                   | $gh$        | -     | 1,04                 |
|                             |       |                   | $a_{15}$    | 1/d   | $1,12 \cdot 10^{-9}$ |
|                             |       |                   | $a_{16}$    | -     | 5,0                  |
|                             |       |                   | $a_{17}$    | -     | 5,5                  |

*Belastungsverlauf:* Abb. 8.3 zeigt die für die Laborversuche gewählte Belastungsgeschichte. Für die rechnerische Simulation sind die auf den Steinsalzprüfkörper angesetzten Belastungen entsprechend den vorgegebenen Axial- und Radialdrücken sowie den gemessenen Fluid- bzw. Kristallisationsdrücken und ihrem zeitlichen Verlauf festgelegt worden. Dabei sind die Streuungen der Messwerte nicht berücksichtigt worden. Der an der Bohrlochwandung angreifende Innendruck wurde als Maximalwert aus Fluiddruck und Kristallisationsdruck definiert.





**Abb. 8.3** Belastungsverläufe der Laborversuche CHM1 und CHM2

### 8.1.1 Berechnungen mit den Stoffmodellen Hooke und LUBBY2-Vergleich von Ergebnissen analytischer und numerischer Berechnungen mit Messwerten.

In einem ersten rechnerischen Ansatz wird zunächst das Tragverhalten des axialge-  
lochten Prüfkörpers mit einem linear-elastischen Stoffmodell analysiert. Die Radial-,  
Tangential- und Axialspannungen entlang eines horizontalen Schnitts durch die Prüf-  
körpermitte sind in Abb. 8.4 dargestellt. Die von FLAC3D berechneten Spannungsver-  
läufe sollten hierbei näherungsweise mit den analytisch nach Lamé berechneten  
Spannungsverläufen übereinstimmen. Für die analytische Berechnung stehen folgende  
Gleichungen zur Verfügung:

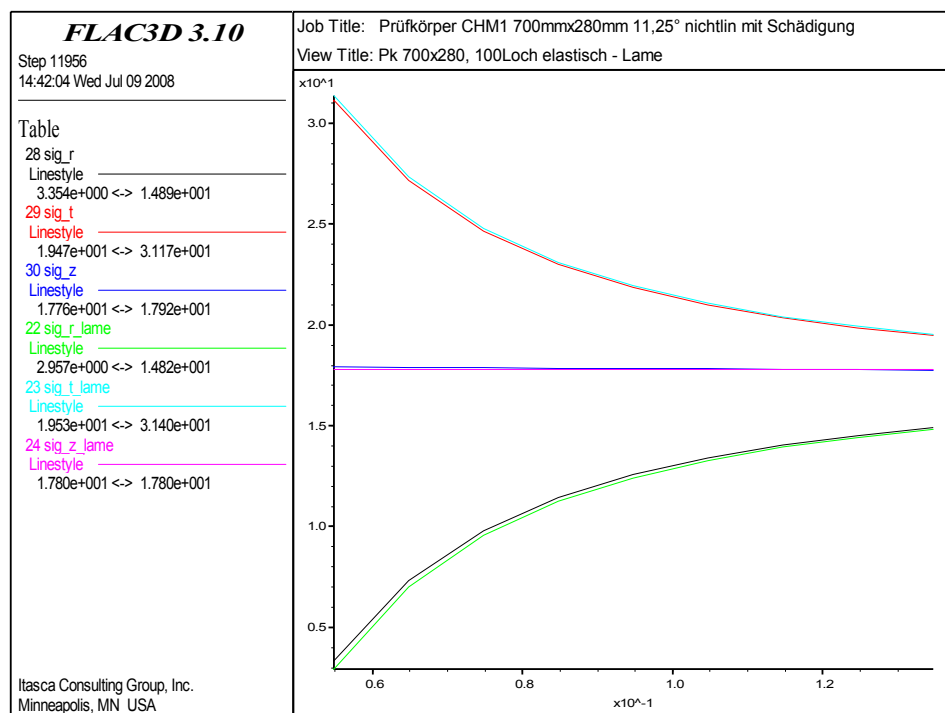
$$\sigma_r = \frac{r_1^2 \cdot p_1 - r_2^2 \cdot p_2}{r_2^2 - r_1^2} - \frac{r_1^2 \cdot r_2^2 \cdot (p_1 - p_2)}{r_2^2 - r_1^2} \cdot \frac{1}{r^2} \quad (8.1)$$

$$\sigma_t = \frac{r_1^2 \cdot p_1 - r_2^2 \cdot p_2}{r_2^2 - r_1^2} + \frac{r_1^2 \cdot r_2^2 \cdot (p_1 - p_2)}{r_2^2 - r_1^2} \cdot \frac{1}{r^2} \quad (8.2)$$

$$\sigma_z = \frac{N}{\pi \cdot (r_2^2 - r_1^2)} \quad (8.3)$$

mit  $\sigma_r$  = Radialspannung [MPa],  $\sigma_t$  = Tangentialspannung [MPa],  $\sigma_z$  = Axialspannung [MPa],  $r_1$  = Innenradius [m],  $r_2$  = Außenradius [m],  $p_1$  = Innendruck [MPa],  $p_2$  = Manteldruck [MPa] und  $N$  = Axialkraft [N].

Die mit obigen Formeln berechneten Spannungsverläufe entsprechen im Fall des axial gelochten Prüfkörpers den Hauptspannungen. Daher sind diese Hauptspannungen für einen direkten Vergleich über eine FISH-Funktion auch in FLAC3D berechnet und zusammen mit den über die FDM berechneten Hauptspannungen in Abb. 8.4 dargestellt worden.



**Abb. 8.4** Vergleich zwischen den analytisch berechneten Spannungen und den mit FLAC3D numerisch berechneten Spannungen (Versuch CHM1).

Abb. 8.4 zeigt, dass die analytisch berechneten Spannungen gut mit den von FLAC3D berechneten Spannungen übereinstimmen. Damit ist die gewählte Diskretisierung des Berechnungsmodells als hinreichend fein belegt.

Nach der Berechnung mit dem linear-elastischen Stoffmodell ist der Versuchsverlauf CHM2 mit dem Stoffmodell LUBBY2 numerisch simuliert worden. Abb. 8.5 zeigt, dass die mit dem Stoffmodell LUBBY2 berechneten Verzerrungen im Fall eines Vollprüfkörpers mit den Verzerrungen aus der linear-elastischen Berechnung (Stoffmodell Hooke)

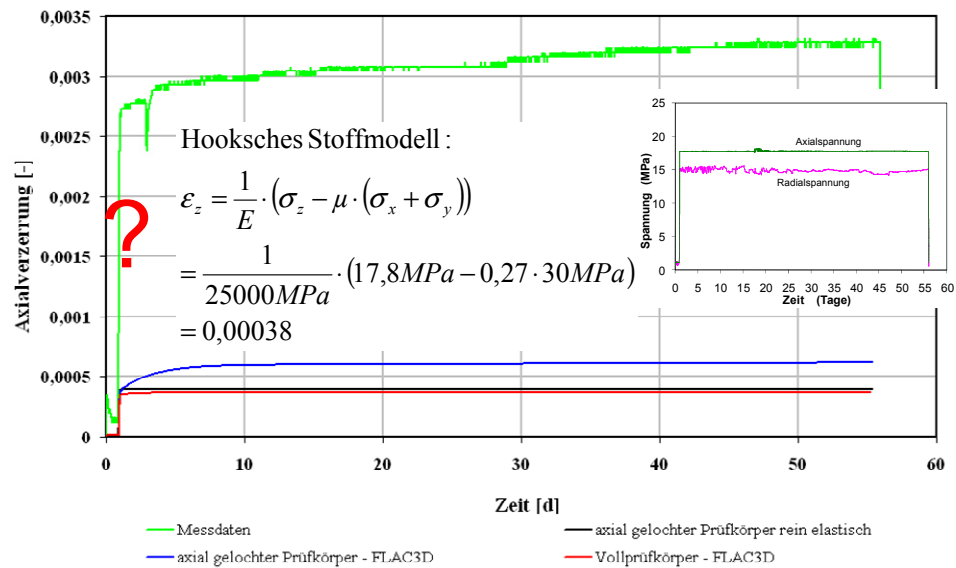
übereinstimmen. Dieser Befund entspricht auch der Theorie, da die näherungsweise isostatische Beanspruchung von  $\sigma_1 = 17,8 \text{ MPa}$  und  $\sigma_{2,3} = 15 \text{ MPa}$  nur zu einer geringen Vergleichsspannung ( $\sigma_V = 2,8 \text{ MPa}$ ) führt und folglich auch nur geringe Kriechverformungen zu erwarten sind. Eine ganz andere Situation liegt beim Prüfkörper mit axialer Bohrung vor, da hier der Innendruck  $p_1$  deutlich kleiner ist als die an den äußeren Randflächen wirkenden isostatischen Druckspannungen, so dass eine Vergleichsspannung  $\sigma_V \neq 0$  resultiert. Während die mit FLAC3D mit dem Stoffmodell Hooke berechneten Axialverzerrungen gut mit dem zugehörigen analytischen Zahlenwert übereinstimmen, weichen die gemessenen Axialverzerrungen deutlich von den berechneten Zahlenwerten ab (Abb. 8.5). Ein gleicher Befund wird auch für die Radial- bzw. Volumenverzerrungen erhalten. Die Berechnungs- und Messdaten differieren qualitativ im Versuch CHM1 ähnlich wie im Versuch CHM2 (nicht dargestellt). In beiden Fällen entsteht die große Diskrepanz zwischen berechneten und gemessenen Verzerrungen bereits im Rahmen der Erstbelastung. Die Erstbelastung erfolgt allerdings in relativ kurzer Zeit und somit fast zeitunabhängig. Das elastisch-viskose Stoffmodell LUBBY2 mit dem linear-elastischen Teilmodell ist folglich nicht in der Lage, die Reaktion des Prüfkörpers auf die im Prinzip instantane Belastungsänderung zutreffend wiederzugeben.

An dieser Stelle wird auch der Unterschied zwischen einem Vollprüfkörper und einem axialgelochten Prüfkörper deutlich. Während bei einem Vollprüfkörper mit einer axialen Belastung von  $\sigma_1 = 17,8 \text{ MPa}$  und einer lateralen Belastung von  $\sigma_{2,3} = 15 \text{ MPa}$  eine effektive Vergleichsspannung von  $\sigma_V = 2,8 \text{ MPa}$  vorliegt, ist die Vergleichsspannung bei einem axial gelochten Prüfkörper zunächst nicht konstant und wird dann im Konturbereich der axialen Bohrung auch signifikant größer. Ursache hierfür ist der Innendruck in der axialen Bohrung, der nur wenige bar beträgt, so dass dadurch an der Kontur eine deutlich höhere Vergleichsspannung von etwa  $\sigma_V = 26 \text{ MPa}$ <sup>4</sup> resultiert (Abb. 8.4). Diese große Vergleichsspannung an der Kontur und auch im konturnahen Bereich hat zur Folge, dass hier der linear-elastische Bereich des Spannungs-Verzerrungs-Verhaltens von Steinsalz deutlich überschritten wird und somit das Hookesche Stoffmodell nicht geeignet ist, das Materialverhalten zutreffend zu beschreiben.

---

<sup>4</sup> An der Kontur sind bei linear-elastischer Berechnung die Hauptspannungen  $\sigma_1 = \sigma_{\text{axial}}$ ,  $\sigma_2 = 2 \cdot \sigma_{\text{radial}}$  (= Manteldruck) und  $\sigma_3 = 0 \text{ MPa}$ . Somit berechnet sich die Vergleichsspannung mit

$$\sigma_V = \sqrt{\frac{1}{2}[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2]} \text{ zu } \approx 26 \text{ MPa.}$$

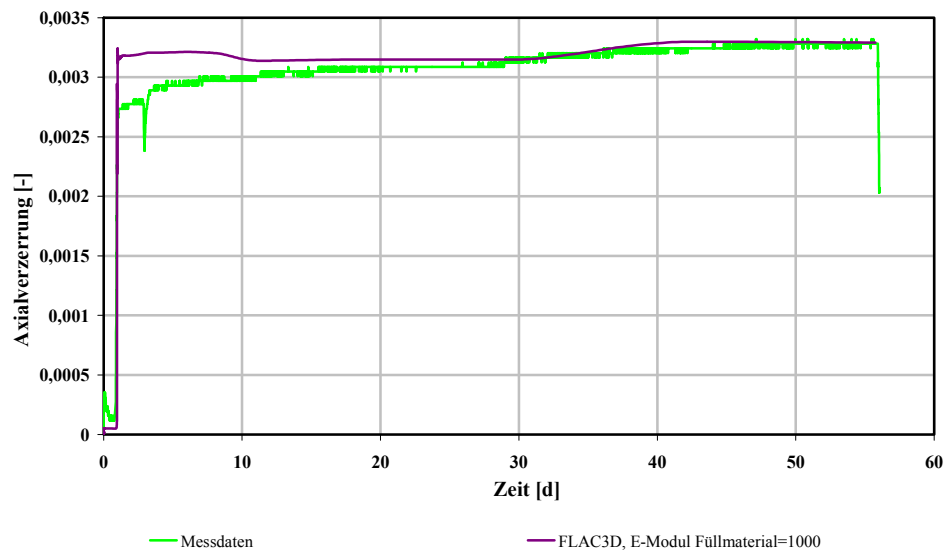


**Abb. 8.5** Vergleich zwischen der gemessenen Axialverzerrung, den Ergebnissen der analytischen Berechnung und den Ergebnissen der numerischen Simulation mit FLAC3D (Stoffmodell Hooke, Stoffmodell LUBBY2 mit und ohne Bohrloch)

Das Spannungs-Verzerrungs-Verhalten von Steinsalz ist bei Aufbringen von derart großen Vergleichsspannungen geprägt durch einen nichtlinearen Verlauf, der z. B. durch ein pseudo-elastisches Stoffmodell abgebildet werden kann ([LUX 84]). Eine Möglichkeit zur Modellierung bietet das Stoffmodell LUBBY1 ([LUX 84]).

### 8.1.2 Berechnungen mit dem Stoffmodell LUBBY1/LUBBY2

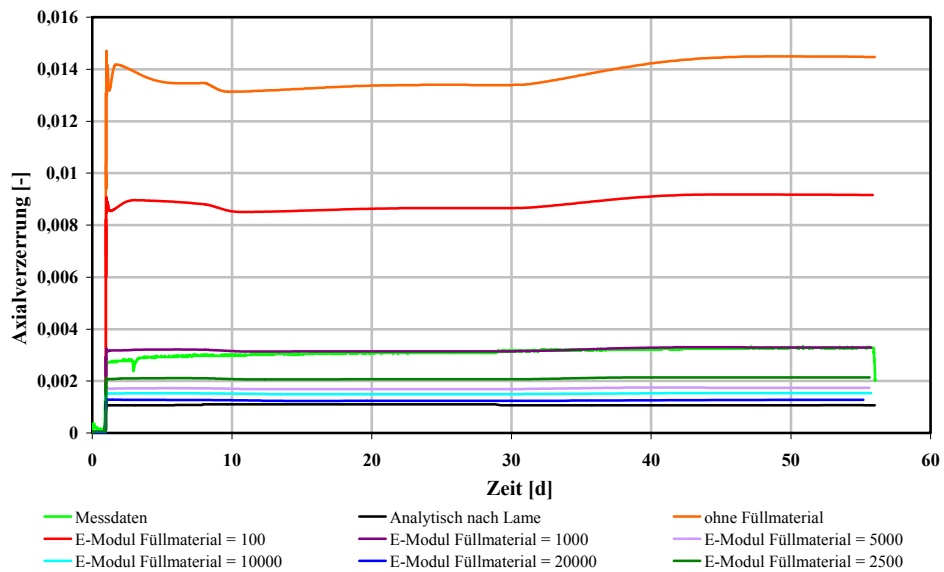
Bereits die ersten Berechnungen zeigen erwartungsgemäß, dass bei gleicher Beanspruchungsänderung mit dem Stoffmodell LUBBY1 deutlich größere Verzerrungen erreicht werden als mit dem Stoffmodell Hooke und sogar deutlich größere Axialverzerrungen als die von der GRS im Versuch gemessenen (Abb. 8.6). Um der Ursache für diese großen rechnerischen Verzerrungen nachzugehen, wurde in der Simulation das Bohrloch mit einer Füllung mit linear-elastischem Materialverhalten versehen. Dabei wurde der E-Modul des Versatzmaterials variiert. Für den trockenen verdichteten SVV dürfte zur Orientierung ein E-Modul von  $E_{SVV} \approx 100 \text{ MPa}$  realistisch sein. Im Rahmen der Sensitivitätsanalyse wurde der E-Modul für den SVV im Bereich  $E_{SVV} = 0 - 20000 \text{ MPa}$  variiert.



**Abb. 8.6** Messdaten und Berechnungsergebnisse mit dem Stoffmodell LUBBY1 /LUBBY2 (EV = 1000 MPa)

Aus den in Abb. 8.7 dargestellten Ergebnissen dieser Sensitivitätsanalyse wird deutlich, dass die großen Verzerrungen nicht in erster Linie aus dem Stoffmodell LUBBY1 resultieren, sondern vornehmlich durch die mechanische Qualität des Versatzmaterials in der axialen Bohrung bedingt sind. Die axialen Verzerrungen variieren zwischen  $\varepsilon_1 = 0,11 \%$  (E-Modul von  $E_{SVV} = 20000 \text{ MPa}$ ) und  $\varepsilon_1 = 1,4 \%$  (E-Modul von  $E_{SVV} = 0 \text{ MPa}$ ).

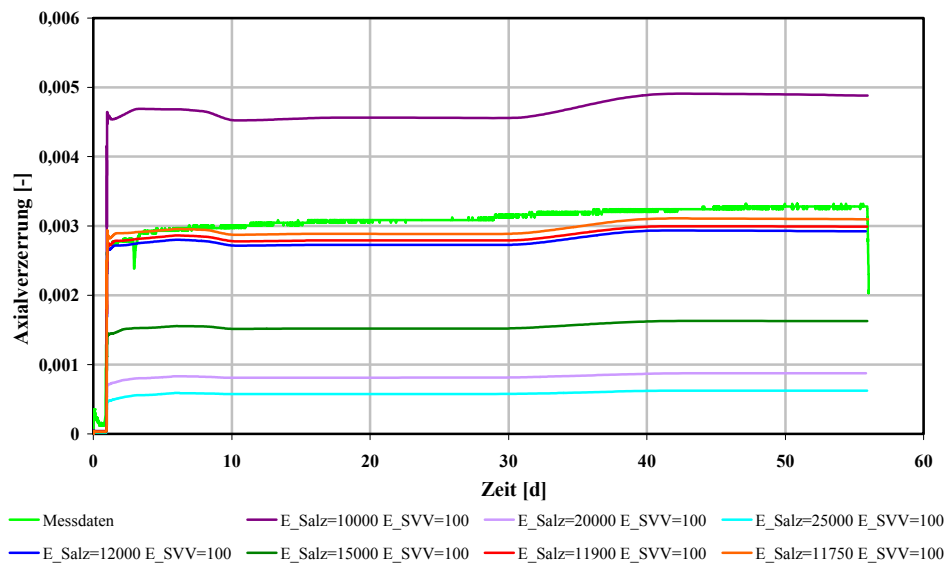
Die mechanische Ursache für diesen Befund ist darin zu sehen, dass das Materialverhalten und hier insbesondere die Steifigkeit des wasserfreien SVVs in dem axialen Bohrloch von entscheidender Bedeutung für das Tragverhalten des Gesamtsystems sind, da das Versatzmaterial der Deformation der axialen Bohrlochwand durch den Aufbau eines Stützdrucks entgegen wirkt. Während die Auswirkungen auf die Axialspannung relativ gering sind, wirkt sich der Stützdruck sowohl auf die Minimalspannung als auch auf die Maximalspannung aus und geht somit mit zweifacher Wirkung in die Vergleichsspannung an der Kontur des Bohrlochs ein. Eine geringere Vergleichsspannung führt einerseits zu geringeren Deformationen und darüber hinaus zu einer Verkleinerung der geschädigten Zone im Konturbereich der Bohrung und verringert somit auch unter diesem Aspekt die Verzerrungen des Prüfkörpers.



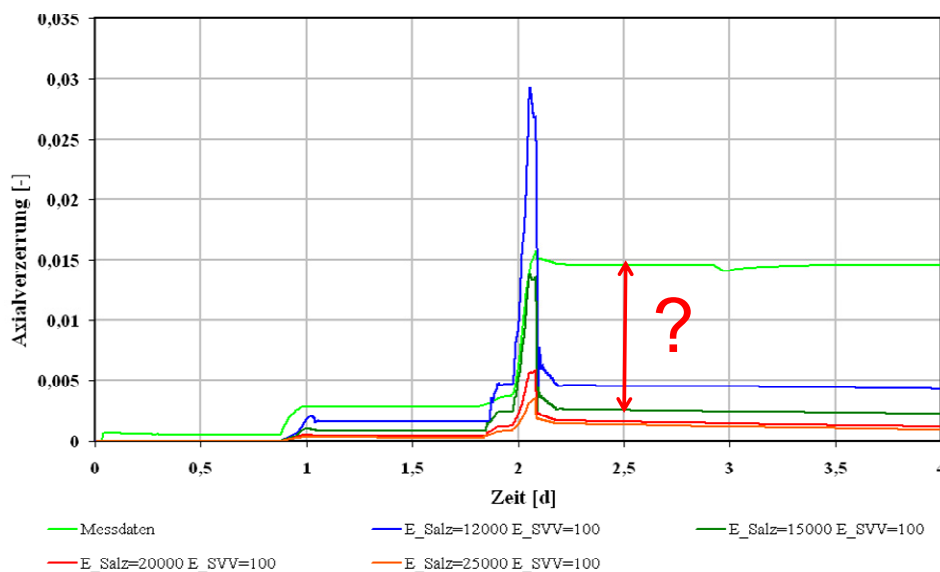
**Abb. 8.7** Messdaten und Berechnungsergebnisse der Sensitivitätsanalyse mit Variation des Verformungsmoduls für das Versatzmaterial mit dem Stoffmodell LUBBY1/LUBBY2 im Bereich  $E_{SVV} = 0 - 20000$  MPa

In den weiteren Berechnungen ist zunächst für das Versatzmaterial ein E-Modul von  $E_{SVV} = 100$  MPa angesetzt worden. Ziel dieser Berechnungen war es, unter dieser Annahme den Anfangselastizitätsmodul  $E_{V0}$  für das Steinsalz zu bestimmen. Hierzu wurden mehrere Berechnungen mit variiertem Anfangselastizitätsmodul für das Steinsalz durchgeführt (Abb. 8.8). Die gemessenen Axialverzerrungen des Versuchs CHM2 können danach bei Ansatz eines E-Moduls von  $E_{Salz} = 11750$  MPa gut angenähert werden.

Ähnlich verhält es sich bei Versuch CHM1, Abb. 8.9. Hier können mit einem E-Modul von  $E_{Salz} = 15000$  MPa die Verzerrungen bis zur Prüfkörperschädigung und auch die Schädigungsphase gut wiedergegeben werden. Allerdings sind die durch die Verringerung der deviatorischen Belastung resultierenden Verzerrungen in der Simulation deutlich geringer ausgeprägt als die gemessenen.



**Abb. 8.8** Messdaten und Berechnungsergebnisse der Sensitivitätsanalyse mit Variation des Verformungsmoduls für das Steinsalz im Bereich  $E_{\text{Salz}} = 0 - 20000$  MPa mit dem Stoffmodell LUBBY1/LUBBY2

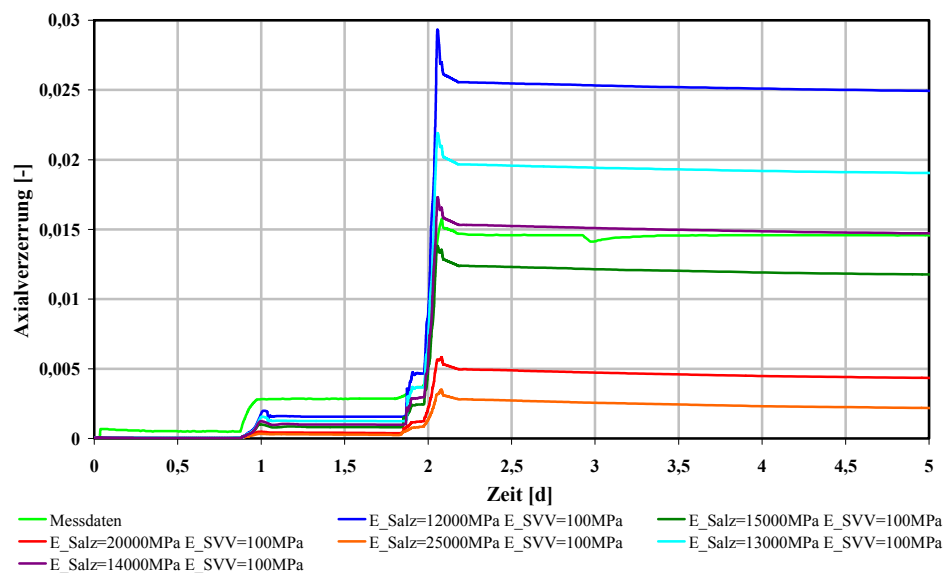


**Abb. 8.9** Berechnete Axialverzerrungen des Versuches CHM1 aus einer Berechnung mit dem Stoffmodell LUBBY1/LUBBY2

Ursache hierfür ist, dass auch bei der Entlastung das Stoffmodell LUBBY1 verwendet worden ist und damit bei abnehmender Beanspruchung der E-Modul wieder erhöht wird und hieraus ein größerer Rückgang der Verzerrungen resultiert. Triaxialversuche zeigen jedoch in Be- und Entlastungsschleifen, dass bei einer Entlastung nicht der An-

fangs-Verformungsmodul bzw. wie im Stoffmodell LUBBY1 ein modifizierter Anfangs-Verformungsmodul, sondern der Ent- und Wiederbelastungsmodul zur realitätsnahen Beschreibung herangezogen werden sollte (Abb. 3.18 und Abb. 11.2). Auf diese Weise kann in der Simulation die remanente Verzerrung abgebildet werden, die nach einer Be- und anschließenden Entlastung verbleibt.

Um diesen Sachverhalt auch in der rechnerischen Simulation zu erfassen, ist in beiden Versuchen zu Beginn der Entlastungsphase das Stoffmodell LUBBY1 wieder durch das linear-elastische Stoffmodell Hooke ersetzt worden. Die Berechnungsergebnisse der auf diese Weise durchgeführten Simulation des Versuches CHM1 stimmen bei einem E-Modul von  $E_{\text{Salz}} = 14000 \text{ MPa}$  nun auch gut mit den gemessenen Verzerrungen überein (Abb. 8.10).



**Abb. 8.10** Simulation der Entlastungsphase mit dem Stoffmodell Hooke anstelle des Stoffmodells LUBBY1 im Stoffmodell LUBBY2 → ein Anfangs-E-Modul von 14000 MPa führt auf eine hinreichende Übereinstimmung von Mess- und Berechnungswerten

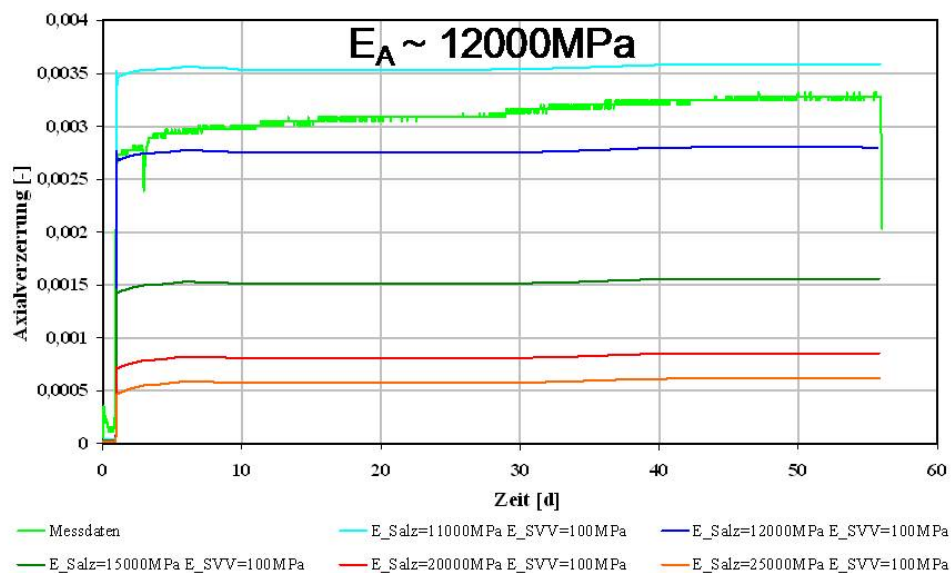
### 8.1.3 Versuchsanalyse mit gleichzeitiger Betrachtung von Axial- und Radialverzerrungen

In den Analysen der vorhergehenden Kapitel sind nur die Axialverzerrungen betrachtet worden. Da davon auszugehen ist, dass sich die Materialeigenschaften des SVV und



hier vermutlich vor allem der Kristallisationsdruck nicht nur auf Axial-, sondern auch auf die Radialverzerrungen des Prüfkörpers auswirken, sollen in diesem Kapitel auch die Radialverzerrungen in die Analyse einbezogen werden. Da die Volumenverzerrungen nicht direkt gemessen worden sind, sondern aus den gemessenen Axial- und Radialverzerrungen berechnet wurden, können diese nicht zusätzlich zur Modellvalidierung herangezogen werden. Sie sind somit bereits in den Axial- und Radialverzerrungen enthalten.

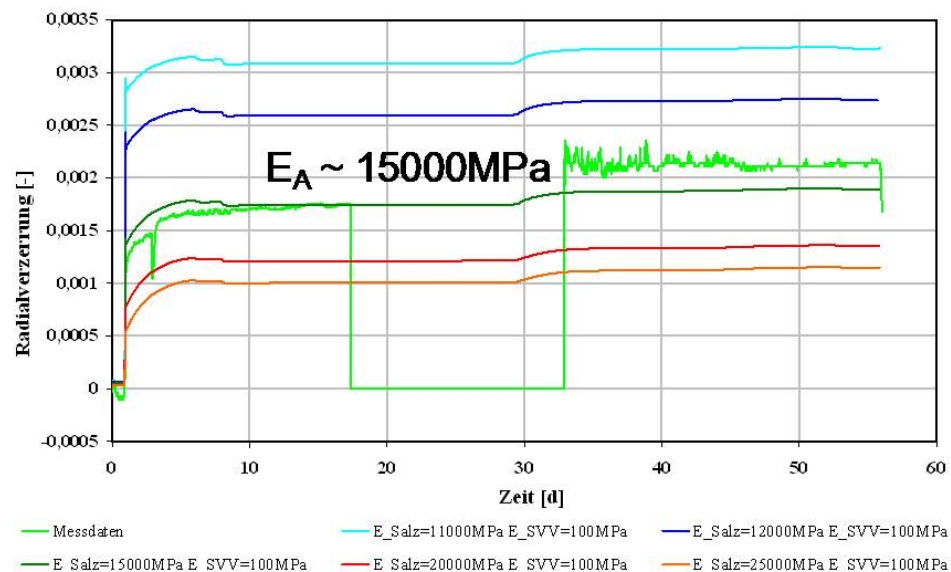
Das Ergebnis dieser Analyse ist in Abb. 8.12 aufgetragen. Ein Blick auf die mit verschiedenen Anfangs-E-Moduli berechneten Axial- und Radialverzerrungen zeigt, dass für die Axialverzerrungen mit  $E_{\text{Salz}} = 15000 \text{ MPa}$  die beste Übereinstimmung erzielt wird, während bei den Radialverzerrungen mit  $E_{\text{Salz}} = 12000 \text{ MPa}$  die beste Übereinstimmung erzielt wird. Folglich verformt sich der Prüfkörper mit diesen Parametern im Experiment im Vergleich zu der Berechnung radial stärker als axial. Für die weiteren Untersuchungen wird die Hypothese aufgestellt, dass dieser Befund auf die Materialeigenschaften des aufgesättigten SVV zurückzuführen ist. Ziel der folgenden Untersuchungen ist es somit, die Eigenschaften des Steinsalzes möglichst genau zu abzubilden und dabei Rückschlüsse auf das Materialverhalten des SVV zu ziehen.



**Abb. 8.11** Axiale Verzerrungen, dargestellt für verschiedene Steinsalz-Verformungsmoduli im Bereich von  $E_{\text{Salz}} = 11.000 - 25.000 \text{ MPa}$

Für die Modellierung der mechanischen Eigenschaften des Steinsalzes sind zunächst nur die Materialparameter Verformungsmodul  $E_V$  und Poissonzahl  $\nu$  betrachtet worden.

Aus Abb. 8.12 ist hier bereits zu erkennen, dass aufgrund der axialen Bohrung im Prüfkörper zwischen der axialen bzw. radialen Verzerrung und dem E-Modul kein linearer Zusammenhang besteht. Zudem verändern sich die Verzerrungen bei unterschiedlichen E-Moduli auch relativ zueinander, das heißt eine Erhöhung des E-Moduls, die axial zu einer Halbierung der Verformung führt, bedingt radial nicht ebenfalls eine Halbierung. Die Poissonzahl bzw. Querdehnungszahl verändert ebenfalls nicht nur die Axial- und Radialverzerrungen, sondern auch deren Verhältnis zueinander.



**Abb. 8.12** Radiale Verzerrungen, dargestellt für verschiedene Steinsalz-Verformungsmoduli im Bereich von  $E_{\text{Salz}} = 11.000 - 25.000 \text{ MPa}$

Auch die Stoffmodellparameter für den SVV beeinflussen sowohl die Axial- wie auch die Radialverzerrungen und deren Verhältnis. Zusätzlich ist zunächst davon auszugehen, dass jeder Parameter von den anderen Parametern abhängt. Eine Isolation einzelner Parameter ist in den ersten Simulationsreihen nicht gelungen. Es muss also versucht werden, durch Variation des kompletten Systems an Parametern für Steinsalz und SVV eine möglichst gute Anpassung an die gemessenen Verzerrungen zu erreichen. Damit die Zahl der dafür benötigten Simulationen nicht den Zeitrahmen des Projektes sprengt, muss allerdings von vornherein versucht werden, die Anzahl der Berechnungen möglichst klein zu halten. Um diese Vorgabe zu erreichen, ist statt des Stoffmodells CWIPP das Stoffmodell Korthaus/Hein verwendet worden. Dieses Stoffmodell hat die Vorteile, dass weniger Materialparametern zu variieren sind und in den numerischen Simulationen eine größere Robustheit zu erwarten ist [EBZ 06], da im Gegensatz zum Stoffmodell CWIPP keine sehr genauen Zeitschrittvorgaben erforder-

lich sind, um instabile numerische Prozesse auszuschließen bzw. um zahlenmäßig richtige Ergebnisse zu liefern. Auch sind die Berechnungszeiten beim Stoffmodell Korthaus/Hein niedriger als beim Stoffmodell CWIPP.

Um die für die Sensitivitätsanalysen erforderlichen Rechenzeiten weiter zu reduzieren, ist beschlossen worden, die Parametervariation nur für den Prüfkörper CHM2 durchzuführen. Hier sind die Rechenzeiten für eine Berechnung etwa 3 bis 4 mal kürzer und der Versuch ist aus wissenschaftlicher Sicht wertvoller, da er über einen Zeitraum von 55 d läuft und somit auch das Kriechverhalten erfasst wurde. Der Versuch CHM1 dagegen enthält nur wenige Informationen über das Kriechverhalten, da er bereits nach 7 d abgebrochen werden musste. Damit sind auch von dem etwa einen Monat andauernden Aushärtungsvorgang im Versuch CHM1 nur die ersten Tage erfasst. Zusätzlich ist beim Versuch CHM2 der Belastungsverlauf einfacher; vor allem aber liegt maximal eine isostatische Belastung von  $\sigma_i = 15$  MPa vor, wodurch die Schädigung deutlich kleiner ist als bei Prüfkörper CHM1, bei dem die maximale Belastung von  $\sigma_1 = 26$  MPa (axial) und  $\sigma_{2,3} = 1$  MPa (radial) aufgebracht wurde.

Als wesentliche und daher zu optimierende Parameter sind somit zu nennen die Parameter E-Modul und Poissonzahl für das Steinsalz und den SVV und die Parameter des Stoffmodells Korthaus/Hein, die die Kompaktion des SVV charakterisieren [EBZ 06]. Beim Stoffmodell Korthaus/Hein werden wiederum auch nur die wesentlichen Parameter betrachtet, wodurch sich insgesamt für die Simulationen die in Tab. 8.4 zusammengestellten Parameter mit zugehörigen Zahlenwerten ergeben:

**Tab. 8.4** Überblick über die Variationsparameter mit Zahlenwerten

| Formelzeichen       | Bezeichnung                             | Streubreite (geschätzt) |
|---------------------|---|-------------------------|
| $E_{\text{Salz}}$   | E-Modul Salz                            | 6000 – 14000 MPa        |
| $\nu_{\text{Salz}}$ | Poissonzahl Salz                        | 0,2 – 0,35              |
| $E_{\text{SVV}}$    | E-Modul SVV                             | 10 – 1000 MPa           |
| $\nu_{\text{SVV}}$  | Poissonzahl SVV [1]                     | 0,2 – 0,4               |
| $Q$                 | Aktivierungsenergie                     | 54,21 kJ/mol            |
| $\eta_0$            | Initielle Porosität                     | 0,50                    |
| $A$                 | Parameter                               | 0,17997                 |
| $a$                 | Parameter                               | 0,01648                 |
| $b$                 | Parameter                               | 0,9                     |
| $c$                 | Parameter                               | 0,1                     |
| $m$                 | Parameter                               | 2,25                    |
| $p_i$               | Vorfaktor für den gemessenen Innendruck | 1                       |

Die vorgegebenen Streubreiten der Materialkennwerte des Stoffmodells Hooke für das Steinsalz beruhen auf Erfahrungswerten. Der exakte Zahlenwert muss jedoch auch bei dem eigentlich in seinen Eigenschaften gut bekannten Material Steinsalz aus dem individuellen Versuch abgeleitet werden. Die möglichen Streubreiten der Materialparameter  $E_{SVV}$  und  $\nu_{SVV}$  für den SVV wurden durch Analogiebetrachtungen eingeschätzt, z. B. mit der Annahme, dass der E-Modul des wasserfreien SVV dem E-Modul eines nicht bindigen dicht gelagerten Lockergesteines in der Größenordnung entsprechen sollte.

Für die Parameter des Stoffmodells Korthaus/Hein ist nur die Anfangsporosität bekannt, die restlichen Parameter sind dagegen unbekannt. Hier werden die Parameter von Salzgrus als Ausgangspunkt gewählt.

Insgesamt sind somit ohne das Kriechverhalten bereits 12 Parameter in die Sensitivitätsanalysen einzubringen, die in Kombination so ermittelt werden müssen, dass die Axial- und Radialverzerrungen möglichst genau abgebildet werden.

Im Folgenden wird von der Hypothese ausgegangen, dass für das Verbundsystem Steinsalz-SVV aus dem Parametersatz, der zur optimalen Übereinstimmung zwischen Berechnungsergebnissen und Messwerten führt, auch gleichzeitig derjenige Parametersatz hervorgeht, der generell das Verhalten des SVV beschreibt. Nicht berücksichtigt werden somit in dieser Hypothese weitere Faktoren wie z. B. Messungenauigkeiten. Anzumerken ist hierbei, dass ein System mit 12 Unbekannten, die über nur 2 Messwerte festgelegt sind, keine eindeutige Lösung besitzen kann und es sogar wahrscheinlich ist, dass mehrere Kombinationen mit guter Übereinstimmung zwischen Mess- und Berechnungswerten existieren. Somit ist es selbst bei einer gefundenen zufriedenstellenden Übereinstimmung möglich, dass noch weitere Parametersätze existieren, die zu einer gleich guten oder sogar besseren Übereinstimmung führen, wobei der Großteil dieser weiteren Parametersätze jedoch rein mathematische Lösungen sein dürften, die zumindest teilweise realitätsferne Parameter aufweisen.

Anzumerken ist auch, dass dadurch, dass die Parameter sich gegenseitig beeinflussen (gekoppelt sind), eine unabhängige Betrachtung nicht möglich ist, sondern das komplette Parametersystem betrachtet werden muss und sich somit die Anzahl der Berechnungen mit der Anzahl der Parameter potenziert. Wird z. B. jeder Parameter nur dreimal variiert, so resultieren hieraus allein bereits  $3^{12}$ , also 59049 einzelne Berechnungen, die mehrere Jahre an Berechnungszeit in Anspruch nehmen dürften.

Hieraus folgt, dass eine Vielzahl an Berechnungen durchzuführen ist und zwar selbst dann, wenn es gelingt, mehrere Parameter zu eliminieren bzw. zu determinieren. Um eine derart große Anzahl an Berechnungen durchführen zu können, war es notwendig, die Berechnungen und deren Auswertung zu automatisieren. Hierzu wurde ein Matlab-Programm erstellt, in dem die zu variierenden Parameter zyklisch in Schleifen durchlaufen werden, jeweils ein Verzeichnis mit den FLAC3D-Eingabedateien für die jeweiligen Parameter erstellt wird und die einzelnen Berechnungen automatisiert über eine \*.bat Datei in der MSDOS-Konsole gestartet wird. Anschließend werden die von FLAC3D berechneten und im jeweiligen Verzeichnis in einer History-Datei abgespeicherten Axial- und Radialverzerrungen eingelesen und der relative Verlauf im Vergleich zu den Messkurven berechnet. Sind die Zahlenwerte jeweils gleich 1, kann von einer sehr guten Übereinstimmung mit den Messkurven ausgegangen werden. Zur weiteren Vereinfachung der Auswertung werden diese beiden Zahlenwerte multiplikativ zu einer einzigen Kenngröße zusammengefasst, wobei Zahlen kleiner 1 invertiert werden. Der auf diese Weise berechnete Kennwert ist ein Indikator für die Güte der jeweiligen Parametervariation.

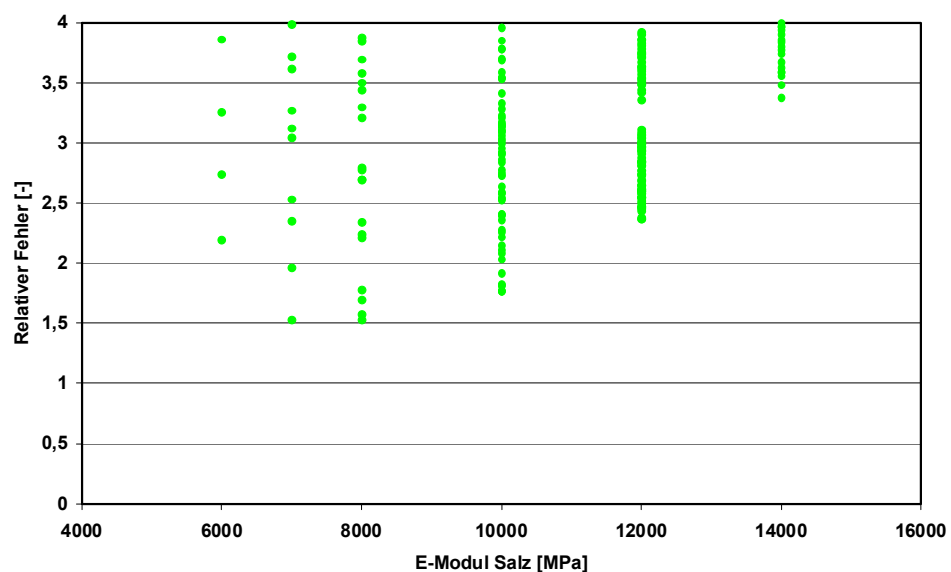
Nach einem Test der Matlabroutine an einzelnen und anschließend mehreren Parametervariationen wurde zunächst mit der Variation der 4 Materialparameter des linear-elastischen Stoffmodells begonnen, um diese 4 Parameter in ihrem Streubreitenbereich weiter einzugrenzen oder sie zu determinieren. Anschließend wurden die elastischen Parameter über die oben aufgeführten Streubreiten in insgesamt 768 Berechnungen variiert. Als Ergebnis zeigten sich tendenziell bezogen auf die vorgegebenen Bandbreiten die besten Übereinstimmungen bei einem relativ kleinen E-Modul für das Steinsalz, bei einem größeren E-Modul für den SVV und bei größeren Poissonzahlen für SVV und Steinsalz. Davon ausgehend wurde der Parametersatz entsprechend abgeändert und die aus Tab. 8.5 zu entnehmenden Variationen mit den 4 elastischen Materialparametern durchgeführt.

**Tab. 8.5** Übersicht über die elastischen Variationsparameter für Steinsalz und SVV

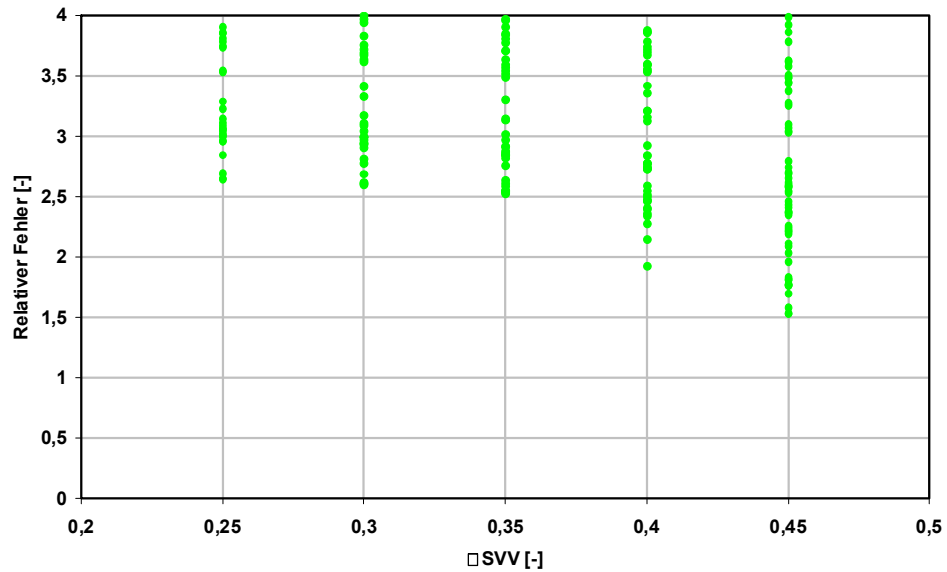
| Parameter                | Werte                                       |
|--------------------------|---|
| E-Modul Steinsalz        | 6000; 7000; 8000; 10000; 12000; 14000 [MPa] |
| $\nu_{\text{Steinsalz}}$ | 0,25; 0,30; 0,35 [1]                        |
| E-Modul SVV              | 50; 100; 150; 200; 300 [MPa]                |
| $\nu_{\text{SVV}}$       | 0,25; 0,30; 0,35; 0,40; 0,45 [1]            |

Die Ergebnisse der Variationsanalyse sind in Abb. 8.13 und Abb. 8.14 aufgetragen. Die Variation der in Tab. 8.5 aufgelisteten Parameter hat die aus den bisherigen Berechnungsbefunden abgeleiteten Vermutungen teilweise bestätigt. Die Variation der Poissonzahl von Steinsalz und des E-Moduls von SVV konnten nicht weiter eingegrenzt werden. Der E-Modul von Steinsalz dagegen scheint relativ gering zu sein, da mit  $E_{\text{Salz}} = 7000$  und  $E_{\text{Salz}} = 8000$  MPa die besten Übereinstimmungen erzielt werden. Abb. 8.13 zeigt auch, dass bei niedrigerem E-Modul die Unterschiede zwischen den einzelnen Berechnungen größer werden. Bei niedrigerem E-Modul für das Steinsalz haben die restlichen Parameter somit einen größeren Einfluss auf das Verhalten des Gesamtparametersystems.

Die Vermutung, dass der SVV eine relativ hohe Poissonzahl aufweist, ist noch weiter bestätigt worden, da die besten Übereinstimmungen bei einer Poissonzahl von  $\nu = 0,45$  erzielt werden (Abb. 8.14). Bei weiteren Simulationen mit variiert Poissonzahl des SVV bei ansonsten konstanten Parametern hat sich gezeigt, dass das Optimum für diesen Parameter unter diesen Randbedingungen im Bereich  $\nu = 0,47$  bis  $0,49$  liegt. Demnach überträgt der SVV den axialen Druck lateral in fast gleicher Größe. Dieser Befund erscheint im Hinblick auf die Erfahrungen aus der Prüfkörperherstellung durch Aufsättigung plausibel, denn dort hat sich gezeigt, dass die Prüfkörper erst nach mehreren Wochen ausgehärtet sind und der SVV bis zur Aushärtung in etwa breiiger Konsistenz vorliegt, was einer Poissonzahl knapp unter dem Zahlenwert  $0,5$  entspricht.



**Abb. 8.13** Relative Fehler der einzelnen Berechnungen in Abhängigkeit vom E-Modul des Steinsalzes  $E_{\text{Salz}}$

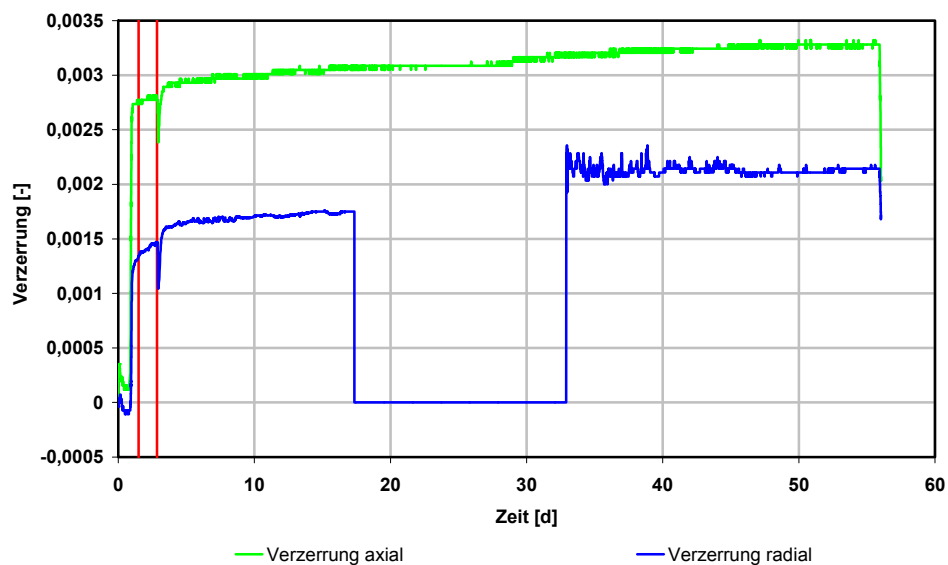


**Abb. 8.14** Relative Fehler der einzelnen Berechnungen in Abhängigkeit der Poissonzahl von SVV  $\nu_{SVV}$

Die in den rechnerischen Simulationen aufgetragenen Innendrucke (statisch äquivalent zu dem Kristallisations- bzw. Fluiddruck) entsprechen näherungsweise den Messwerten der GRS. Da der Innendruck einen markanten Einfluss vor allem auf die Radialverformung haben kann und der lokale Messwert nicht den Druck im gesamten SVV widerspiegelt, ist zu den in den Simulationen zu variierenden Parametern der Innendruck hinzugefügt worden und zwar nicht in Form eines absoluten Zahlenwertes, sondern über einen Vorfaktor, mit dem der von der GRS gemessene Druck belegt wurde. Variiert wurde der Innendruck zunächst mit den Vorfaktoren 0, 0,5, 1, 2 und 3. Hierbei hat sich gezeigt, dass der Innendruck in den bisherigen Parametervariationen im Vergleich zu den anderen Parametern eine nur relativ geringe Auswirkung auf die Verzerrungen des Prüfkörpers hat.

Wie in Kap. 3.3 und Kap. 5.7 gezeigt, sind die Materialeigenschaften des SVV während des Aushärtungsprozesses aus chemischer Sicht äußerst komplex. Im Hinblick auf das mechanische Verhalten sind daher eher heterogene Verhältnisse zu erwarten (zeitlich, räumlich). Aus diesem Grund wird im Folgenden nicht mehr die Mess- bzw. Berechnungskurve insgesamt betrachtet, sondern zunächst nur der Anfangsteil vor der Aufsättigung des SVV (Abb. 8.15). In dieser Phase ist der SVV wasserfrei und der chemische Aushärtungsprozess, der die mechanischen Parameter verändert, hat noch nicht begonnen. In dieser Phase sollte sich ein ähnliches Materialverhalten wie bei Salzgrus

einstellen, das dann mit dem Stoffmodell Korthaus/Hein beschrieben werden könnte. Da mit dem Stoffmodell Korthaus/Hein insgesamt 7 zusätzliche Parameter in die Parametervariation einzubringen sind, sind dann diese 7 Parameter zunächst jeweils einzeln zusammen mit den bisher als optimal identifizierten elastischen Parametern, dem Innendruck und den Parametern für Salzgrus variiert worden. Bei diesen Berechnungen zeigte sich, dass die Parameter A, a und b des Stoffmodells Korthaus/Hein einen vergleichsweise geringen Einfluss ausüben und somit die Parameter Q,  $\eta_0$ , c und m weiterzuverfolgen sind. Die Anfangsporosität ist experimentell auf den Zahlenwert  $\eta_0 = 0,5$  festgelegt worden, wodurch 3 zusätzliche Parameter verbleiben.



**Abb. 8.15** Gemessene Axial- und Radialverformungen mit rot markiertem Anfangsbereich

Um die Anzahl an Berechnungen bei immerhin noch 7 zu variierenden Parametern weiterhin möglichst gering zu halten, wurde versucht, die Parameter iterativ zu nähern. Da die meisten Parameter einzeln variiert einen Minimalwert aufwiesen bzw. sich asymptotisch einem Zahlenwert annähern, ist es wahrscheinlich, dass auch die Parametervariation insgesamt konvergiert und durch Iteration ein Minimum gefunden werden kann. Bei den iterativen Berechnungen wurde jeweils ein Satz an Anfangswerten für die einzelnen Parameter vorgegeben und anschließend ein Parameter nach dem anderen variiert und der beste Zahlenwert für die Optimierung des nächsten Parameters übernommen. Hierbei zeigte sich, dass die Parametervariation konvergiert und sich bereits nach dem ersten Durchlauf die meisten Parameter in der Regel nur noch



relativ wenig änderten. Es zeigte sich jedoch auch bei zwei weiteren Iterationen, dass es bezogen auf die Zielgröße nicht nur ein Minimum gibt, sondern mehrere. Dieser Befund wurde deutlich, indem 3 Iterationen mit jeweils anderen Anfangswerten durchgeführt wurden. Alle 3 Iterationen kamen hierbei zu anderen Ergebnissen (Tab. 8.6).

**Tab. 8.6** Die optimalen, durch Iteration ermittelten Parameter ausgehend von unterschiedlichen Anfangsparametern

| Parameterwert     | Iteration 1 | Iteration 2 | Iteration 3 |
|-------------------|-------------|-------------|-------------|
| $E_{\text{Salz}}$ | 8750        | 12000       | 7000        |
| $v_{\text{Salz}}$ | 0,3         | 0,28        | 0,34        |
| $E_{\text{SVV}}$  | 200         | 300         | 300         |
| $v_{\text{SVV}}$  | 0,46        | 0,3         | 0,46        |
| A                 | 0,5         | 0,1799712   | 0,0009      |
| Q                 | 54,21       | 54,21       | 54,21       |
| $\eta_0$          | 0,5         | 0,5         | 0,5         |
| a                 | 0,015       | 0,01648     | 0,01648     |
| b                 | 0,5         | 0,9         | 0,05        |
| c                 | 0,1         | 0,1         | 0,5         |
| m                 | 2,25        | 2,25        | 2,25        |
| $p_i$             | 1           | 1           | 1           |
| Abweichung        | 1,7608      | 1,7766      | 1,2620      |

Fazit der iterativen Ermittlung der Parameter ist folglich, dass zwar ein Minimum gefunden werden kann und diese Analyse nur 100 bis 200 Berechnungen erfordert, dieses Minimum jedoch nur eines von mehreren Minima ist und vermutlich sogar sehr viele Minima bestehen, so dass die Wahrscheinlichkeit eher gering ist, einen realitätsnahen Parametersatz insgesamt gefunden zu haben. Die iterative Sensitivitätsanalyse ist folglich nicht geeignet, um die Parameter in ihren gesamten Streubereichen zu untersuchen, sondern nur, um bereits grob bestimmte Parametersätze weiter zu determinieren. Im Folgenden wurden daher wieder die Parameter zyklisch variiert und erst anschließend der beste Parametersatz iterativ genauer determiniert.

#### 8.1.4 Analyse mit Berücksichtigung der Kriechverzerrungen des Steinsalzes

Um auch die Kriechverzerrungen zu berücksichtigen, ist der Parametersatz um die Stoffmodellparameter des Stoffmodells LUBBY2 ergänzt worden. Für das eher kurzfristige Materialverhalten im Anschluss an eine Beanspruchungsänderung ist vorwiegend der transiente Anteil des Kriechens maßgeblich, während der stationäre Anteil noch vernachlässigbar ist. Entsprechend wurden die zu variierten Parameter des Stoffmodells LUBBY2 und ihr Wertebereich ausgewählt und der bisherige Bestand an Variationsparametern um die Parameter  $\overline{G}_K$ ,  $\overline{\eta}_k$  und  $\overline{\eta}_m$  des Stoffmodells LUBBY2 ergänzt. Die Zahlenwerte sind anhand der bisherigen Erfahrungen ausgewählt worden.

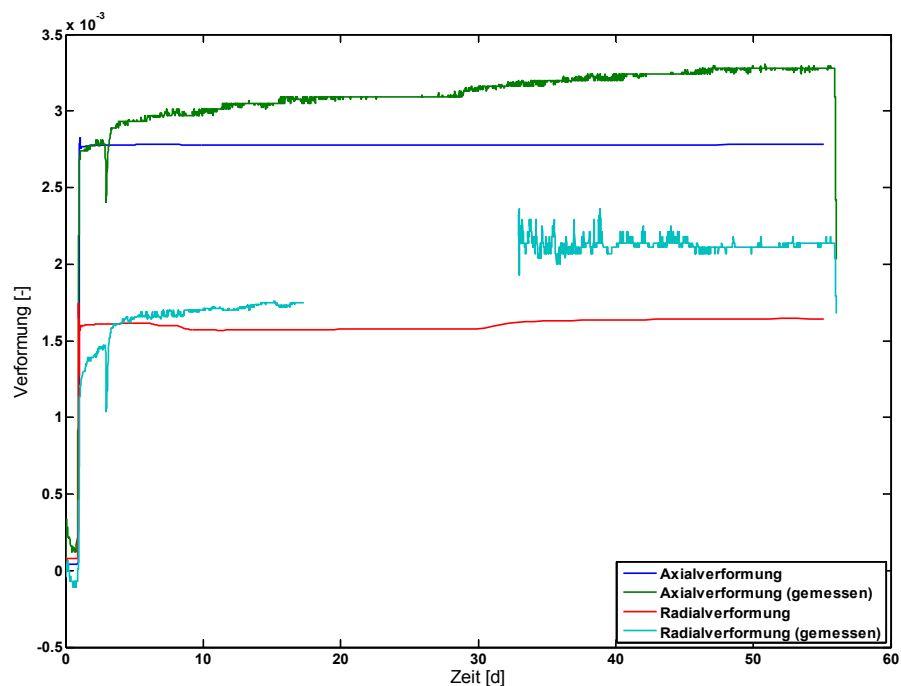
Wie aus Tab. 8.7 zu ersehen ist, sind nur 3 der 6 Materialparameter des Stoffmodells LUBBY2 variiert worden und zwar die Parameter  $\overline{G}_K$  und  $\overline{\eta}_k$ , die ausschlaggebend für die Größe und den Verlauf des transienten Kriechanteils sind und  $\overline{\eta}_m$ , das den stationären Kriechanteil mitbestimmt. Die elastischen Parameter sind den bisherigen Erfahrungen entsprechend variiert worden. Auf diese Weise konnte die Gesamtanzahl der Berechnungen auf 2430 beschränkt werden.

**Tab. 8.7** Liste der variierten Parameter unter Berücksichtigung des elastischen Materialverhaltens von Steinsalz und SVV sowie der Kompaktion des SVV und des Kriechens des Steinsalzes

| Parameter           | Wertebereich                                  |
|---------------------|---|
| $E_{\text{Salz}}$   | 7000; 8000; 10000; 12000; 20000; [MPa]        |
| $\nu_{\text{Salz}}$ | 0,27; 0,3; [1]                                |
| $E_{\text{SVV}}$    | 50; 100; 300; [MPa]                           |
| $\nu_{\text{SVV}}$  | 0,4; 0,45; 0,48; [1]                          |
| $A$                 | 0,1799712 [1]                                 |
| $Q$                 | 54,21 [kJ/mol]                                |
| $\eta_0$            | 0,5 [1]                                       |
| $a$                 | 0,01648 [1]                                   |
| $b$                 | 0,9 [1]                                       |
| $c$                 | 0,1 [1]                                       |
| $m$                 | 2,25 [1]                                      |
| $p_i$               | 1 [1]   |
| $\overline{G}_K$    | 10000; 50888; 100000; [MPa]                   |
| $\overline{\eta}_k$ | 20000; 89400; 200000; [MPa]                   |
| $\overline{\eta}_m$ | $10^7$ ; $4,06 \cdot 10^7$ ; $10^8$ ; [d·MPa] |

In Abb. 8.16 sind die berechneten Axial- und Radialverzerrungen dargestellt, die mit dem Parametersatz berechnet wurden, der in der Anfangsphase die beste Übereinstimmung zwischen Berechnungs- und Messwerten aufweist. Im Anfangsbereich können hierbei die Radialverzerrungen gut abgebildet werden und bei den Axialverzerrungen kann eine exzellente Übereinstimmung erzielt werden.

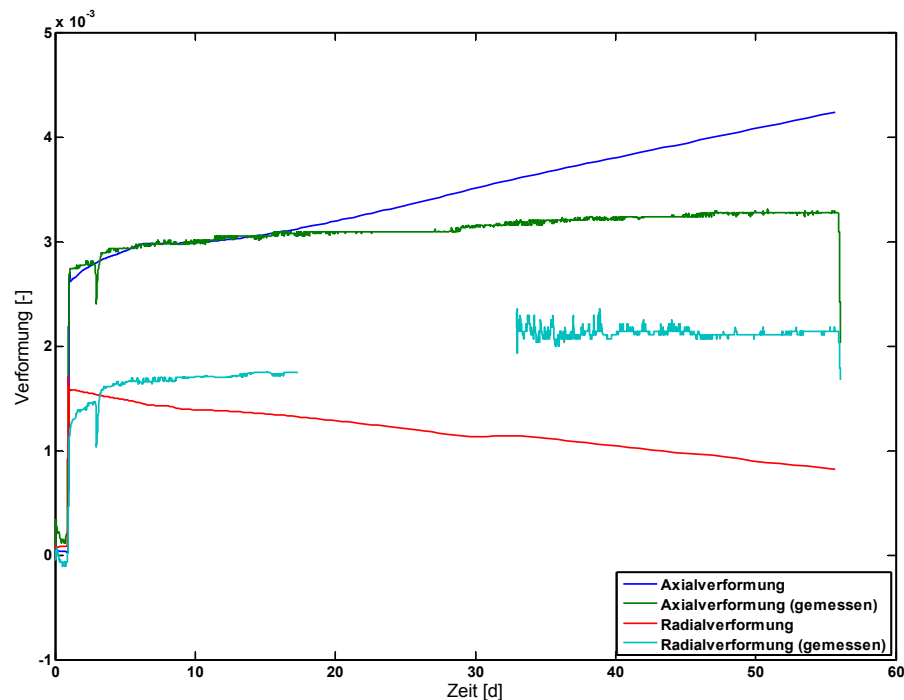
Bei der Aufsättigung des SVV mit NaCl-Lösung ergibt sich im SVV eine exotherme Reaktion mit entsprechenden Temperaturänderungen und temperaturänderungsbedingten Verzerrungen. Diese Verzerrungen sind in Abb. 8.16 deutlich zu erkennen, jedoch sind sie reversibel und beeinflussen die Messdaten nur kurze Zeit. Eine Berücksichtigung der temperaturbedingten Verzerrungen dürfte die Aussagen zum Materialverhalten des SVV nur wenig verbessern, würde jedoch die Berechnungszeiten durch die erforderliche mechanisch-thermische Kopplung wesentlich erhöhen und Parametervariationen dadurch stark einschränken.



**Abb. 8.16** Vergleich der gemessenen Axial- und Radialverformungen mit berechneten Axial- und Radialverformungen, des Parametersatzes mit der besten Übereinstimmung in der Anfangsphase

Im Folgenden ist daher zunächst versucht worden, von dem Parametersatz mit der bisher besten Übereinstimmung ausgehend die stationären Kriechparameter anzupassen. Hierbei wurden nur noch die für das stationäre Kriechen zuständigen Parameter

$m$  und  $\bar{\eta}_m$  variiert. Die Berechnungsergebnisse mit der besten Übereinstimmung sind in Abb. 8.17 dargestellt. Während sich bei den Axialverzerrungen eine gute Übereinstimmung in den ersten 15 Tagen ergibt, ist der Verlauf der Kriechverzerrungen in radialer Richtung nach der Anfangsphase in Berechnung und Messung entgegengesetzt. Bei allen gewählten Parametern zeigte sich, dass der Kriechanteil der Verzerrungen in den Berechnungen rückläufig ist. In den Berechnungen kommt es folglich zu einer Volumenverringerung des Modells und damit zu einer Kompaktion des SVV in der Bohrung, da das Steinsalz im Stoffmodell LUBBY2 bei konstanter Belastung sein Volumen nicht ändert. In der Simulation leistet der SVV dementsprechend nach der Anfangsphase einer Kompaktion weniger Widerstand entgegen als im Versuch und die Berechnungen belegen somit indirekt, dass während des Versuchs eine Aushärtung des SVV erfolgt.



**Abb. 8.17** Vergleich der gemessenen Axial- und Radialverformungen mit berechneten Axial- und Radialverformungen für den Parametersatz mit der besten Übereinstimmung

Deutlich wird dieser Vorgang insbesondere auch an den Axialverzerrungen, die im Experiment durch den Aushärtungsprozess beeinflusst werden und sich die Verfestigung des SVV somit auf die Gesamtverzerrungen dadurch auswirkt, dass trotz des ver-

gleichsweise kleinen Volumenanteils des SVV von  $V = 12,76 \%$  ein Rückgang des stationären Kriechens um mehr als eine Größenordnung bewirkt wird.

**Tab. 8.8** Auflistung des Parametersatzes mit der besten Übereinstimmung zwischen Mess- und Berechnungswerten

| Parameter           | Wert      | Einheit | Parameter    | Wert           | Einheit |
|---------------------|-----------|---------|--------------|----------------|---------|
| $E_{\text{Salz}}$   | 6500      | MPa     | $A_0$        | 0,08           | -       |
| $v_{\text{Salz}}$   | 0,31      | -       | $A_1$        | 6              | -       |
| $E_{\text{SVV}}$    | 200       | MPa     | $A_2$        | 4              | -       |
| $v_{\text{SVV}}$    | 0,49      | -       | $A_3$        | $2,0010^{-10}$ | 1/d     |
| $A$                 | 0,1799712 | -       | $A_4$        | 0,855          | -       |
| $Q$                 | 54,21     | kJ/mol  | $A_5$        | 0,04           | 1/MPa   |
| $\eta_0$            | 0,5       | -       | $A_6$        | 53             | MPa     |
| $a$                 | 0,015     | -       | $A_7$        | 27,6           | MPa     |
| $b$                 | 0,8       | -       | $A_8$        | 0,25           | 1/MPa   |
| $c$                 | 0,2       | -       | $A_9$        | 1              | -       |
| $m$                 | 2,25      | -       | $A_{10}$     | 0,25           | 1/MPa   |
| $p_i$               | 1         | -       | $A_{15}$     | $1,1210^{-9}$  | 1/d     |
| $\overline{G}_K$    | 90000     | MPa     | $A_{16}$     | 5              | -       |
| $k_1$               | -0,01     | 1/MPa   | $A_{17}$     | 5,5            | -       |
| $L$                 | 0         | 1/K     | $fc1$        | 28             | MPa     |
| $\overline{\eta}_k$ | 100000    | MPa d   | $fc2$        | 4              | -       |
| $k_2$               | -0,3      | 1/MPa   | $fs1$        | 950            | MPa d   |
| $\overline{\eta}_m$ | 10000000  | MPa d   | $fs2$        | 1,5            | -       |
| $m$                 | -0,247    | 1/MPa   | $fh$         | 3200           | d       |
| $l$                 | 0         | 1/K     | $gh$         | 1,04           | -       |
| $D_{\text{max}}$    | 0,4       | -       | $n$ (LUBBY1) | 3,86           | -       |
|                     |           |         | $B$ (LUBBY1) | $1,345E+09$    | -       |

## 8.2 Diskussion und Zusammenfassung

Ziel der Simulation der Bohrkernversuche war es, anhand der von der GRS gemessenen Daten Rückschlüsse auf das Materialverhalten des SVV zu ziehen. Von Bedeutung hierfür ist die möglichst exakte Modellierung der Steinsalzbereiche des Prüfkörpers (Hohlzylinder), um auszuschließen, dass vermeintliche Materialeigenschaften des SVV nicht tatsächlich durch eine von der Realität abweichende Modellierung des Steinsalzes bedingt sind.

Um dies auszuschließen wurde ein geometrisches Modell in Form eines Zylindersegmentes erstellt und dieses Modell zunächst rein elastisch über einen Vergleich mit den

theoretischen Spannungen und Verformungen nach LAME verifiziert. Zwar zeigen die analytischen und die numerischen Ergebnisse sehr gute Übereinstimmung, doch weichen die Messwerte deutlich ab, da mit dem Stoffmodell Hooke wesentliche Eigenschaften wie z. B. die Entfestigung bei zunehmender Belastung oder das Kriechverhalten nicht enthalten sind. Im Folgenden konnte gezeigt werden, dass diese großen Differenzen zwischen gemessenen und berechneten Verzerrungen nicht durch das transiente Kriechen (Stoffmodell LUBBY2) bedingt sind, sondern durch die zunehmende Entfestigung bei zunehmender Belastung (Stoffmodell LUBBY1). Mit dem Stoffmodell LUBBY1 konnten die Axialverzerrungen der Versuche CHM1 und CHM2 bei geeignetem E-Modul für das Steinsalz bis einschließlich der Schädigungsphase in guter Übereinstimmung abgebildet werden. Für die Simulation der Entlastungsphase konnte gezeigt werden, dass das Stoffmodell Hooke anstelle des Stoffmodells LUBBY1 deutlich besser geeignet ist.

Im Gegensatz zur oben geschilderten Abbildung der Axialverzerrungen zeigen die gemessenen Radialverzerrungen jedoch nur eine mäßige Übereinstimmung mit den Messwerten. Deshalb wurde für die weiteren Berechnungen die Hypothese verwendet, dass diese Abweichungen zwischen Axial- und Radialverzerrungen durch die Materialeigenschaften des SVV bedingt sind. Auf dieser These aufbauend wurden im Folgenden die Parameter für das Steinsalz und den SVV variiert, um eine möglichst gute Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Verzerrungen zu erhalten.

Bei den Sensitivitätsanalysen hat sich gezeigt, dass sehr viele Berechnungsläufe notwendig werden, da die Anzahl an Parametern, die variiert werden müssen, sehr groß ist und die Parameter aufgrund der gegenseitigen Kopplung nicht unabhängig voneinander betrachtet werden können. Um die Zahl der Berechnungen zu reduzieren, wurde deshalb ein alternatives Verfahren mit einer iterativen Bestimmung des optimalen Materialparametersatzes untersucht. Es stellte sich jedoch heraus, dass dieses Verfahren zwar konvergiert, jedoch der optimale Materialparametersatz je nach Startparametern unterschiedliche Zahlenwerte annimmt und so kein eindeutiger Parametersatz ermittelt werden kann.

Für die weiteren Untersuchungen wurden zunächst das Modell, der Berechnungsablauf und die Zeitschrittsteuerung optimiert, um die Berechnungszeiten möglichst gering zu halten. Um die Anzahl der Berechnungen zu verringern, wurde auf die Simulation des Versuches CHM1 verzichtet, da dieser Versuch vorzeitig abgebrochen werden musste und der Aushärtungsprozess somit nur partiell erfasst worden ist. Anschlie-

ßend wurden Parameter einzeln variiert mit dem Ziel, den Einfluss der einzelnen Materialparameter und damit ihre Relevanz für das Gesamtsystem zu bestimmen. Nachdem auf diese Weise die Zahl der Berechnungsläufe stärkstmöglich reduziert wurde, wurde mit den umfangreichen Sensitivitätsanalysen begonnen.

Als Ergebnis dieser Sensitivitätsanalysen kann festgehalten werden, dass mit den in Tab. 8.8 aufgelisteten Parametern der Versuch CHM2 von der GRS bezüglich der Axial- und der Radialverzerrungen gut abgebildet werden kann. Für die Ermittlung der Parameter ist jedoch ein enormer Aufwand notwendig, da die Parameter individuell an das Verbundsystem Prüfkörper-Bohrloch-Bohrlochverfüllung angepasst werden müssen und dafür eine sehr große Anzahl an Berechnungen notwendig ist. Für die Ermittlung des obigen Parametersatzes wurden insgesamt mehr als 5000 verschiedene Kombinationen aus den Parametern berechnet. Zu den Materialeigenschaften des SVV kann dabei festgehalten werden, dass in den Berechnungen die anfänglich breiige Konsistenz durch die große Poissonzahl von  $\nu = 0,49$  dargestellt werden kann. Die aushärtungsbedingte Verfestigung des SVV ist in der Simulation nicht berücksichtigt. Daher kommt es in der rechnerischen Simulation entsprechend dem Stoffmodell Korthaus/Hein zu einer Kompaktion des SVV, die aber im Versuch nicht beobachtet wird (Abb. 8.17). Auf diese Weise wird indirekt die Aushärtung bestätigt, da die Simulation des Versuches CHM2 unter Berücksichtigung des stationären Kriechens darauf schließen lässt, dass tatsächlich eine Verfestigung des Materials vorliegt, die die radialen Verzerrungen drastisch beeinflusst und auch auf die axialen Verzerrungen trotz des insgesamt nur kleinen Volumenanteils des SVV am Volumen des Prüfkörpers insgesamt einen großen Einfluss hat.





## **9 Weiterentwicklung des Programmsystems GeoSys**

### **9.1 Einleitung**

Im Rahmen des BMBF-Vorhabens 02 C 1295 wurde das wissenschaftliche Programmsystem GeoSys/RockFlow systematisch weiterentwickelt. Der Schwerpunkt lag dabei auf hydro-mechanischen-chemischen (C:HM) Prozessen für Bentonite, Salzgestein und Materialien zum selbstverheilenden Versatz (SVV). Die Modellentwicklung für C:HM Prozesse ist im Kap. 9.2 zusammengestellt. Dabei ging es vor allem um die Modellierung von Quellprozessen in Bentoniten und Deformationsvorgängen in Salzgestein und SVV sowie um chemische Reaktionen in beiden Materialien. Während der Laufzeit des Vorhabens erfolgt ein wichtiger software-technischer Schritt, die Neuimplementierung von RockFlow auf objektorientierten Prinzipien in der Programmiersprache C++ (ab Version 4). Dies war erforderlich, um den Ansprüchen der vielfältigen Prozesskopplungen Rechnung tragen zu können (Kap. 9.3). Der erreichte Stand des numerischen Modellierungsinstrumentariums ist im Kap. 9.4 mit Testbeispielen und ersten Anwendungen belegt. Im Rahmen des Vorhabens entstanden 11 wissenschaftliche Publikationen, davon 7 in hochrangigen Fachzeitschriften. Die wichtigsten sind in der Anlage zusammengestellt. Ein besonders wichtiges komplementäres Vorhaben war das internationale Benchmarking-Projekt DECOVALEX, in dem Testbeispiele für die Modellierung thermo-hydro-mechanisch-chemischer (THMC) Prozesse entwickelt wurden und GeoSys mit verschiedenen Codes wie TOUGH-REACT/FLAC und ROCMAS und verifiziert wurde ([RUT 08], [RUT 09]).

In der vorliegenden Zusammenfassung werden die wichtigsten Ergebnisse kompakt zusammengestellt. Eine ausführliche Beschreibung der wissenschaftlichen Resultate ist in den Veröffentlichungen zu finden, die als Anlage beigelegt sind.

### **9.2 Modellentwicklung**

Die Modellentwicklung wurde für die Verschlussmaterialien Bentonit (für Lagerung im Kristallin) und SVV (für Lagerung im Salzgestein) betrieben. Die Simulation hydromechanisch bedingter Quellprozesse in Bentonit ist im Kap. 2 dieses Berichtes ausführlich dargestellt. Bezüglich dieser Materialien soll im Weiteren lediglich die numerische Ana-

lyse reaktiver Transportprozesse betrachtet werden. Die notwendigen methodischen und numerischen Untersuchungen zur Modellierung unterschiedlicher, miteinander gekoppelter Prozesse im SVV mit dem Programmsystem GeoSys/RockFlow werden hier in wichtigen Aspekten umfassend diskutiert.

### **9.2.1 HC-Prozess: Reaktiver Stofftransport in einem lösungserfüllten Porenraum**

Hydro-mechanische und chemische Prozesse sowie deren Wechselwirkungen wurden modellhaft untersucht.

In [XIE 06] wurde das erste reaktive Transportmodell in GeoSys präsentiert (Version 3.8). Dabei wurde der geochemische Simulator PHREEQC (Parkhurst) in ein Mehrkomponenten-Transportmodell eingebettet. In PHREEQC werden chemische Reaktionen nach dem Massenwirkungsgesetz berechnet. Das Kopplungsschema beruht auf dem Operator-Splitting Prinzip: nach jedem Transportschritt erfolgt ein Reaktionsschritt.

Das Modell hat folgende Eigenschaften:

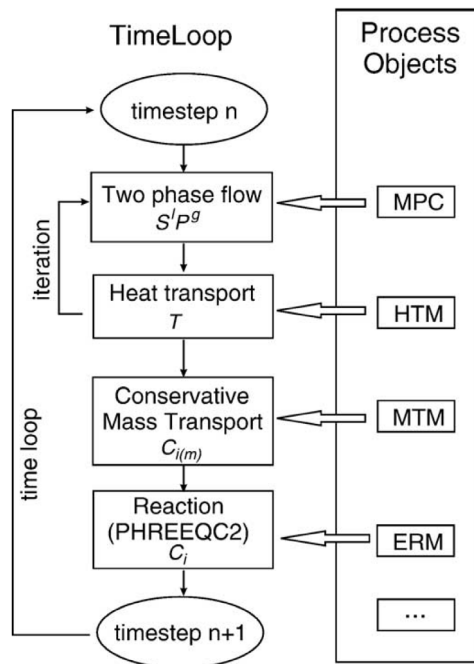
- Ungesättigte Strömung (Richards-Modell)
- Chemische Quellprozesse nach der double-diffusive-layer (DDL) Theorie ([XIE 04])
- Wärmetransport (lokales thermodynamisches Gleichgewicht)
- Mehrkomponententransport (chemische Spezies)
- Berücksichtigung von temperaturabhängigen Reaktionen

Gegenstand der Arbeit war vor allem die Untersuchung der Rolle temperaturabhängiger chemischer Reaktionen. Der geochemische Simulator PHREEQC ist für chemische Prozesse in Grundwassersystemen ausgelegt (Systemtemperaturen ca. 15 °C). Für die Übertragung auf geotechnische Systeme war daher eine Erweiterung notwendig, um temperaturabhängige Reaktionen berücksichtigen zu können. Zwei Modelle wurden implementiert, die van't Hoff Gleichung

$$\ln\left(\frac{K_2}{K_1}\right) = \frac{\Delta H^0}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \quad (9.1)$$

und eine analytische Gleichung für die Bestimmung temperaturabhängiger Aktivitätskoeffizienten:

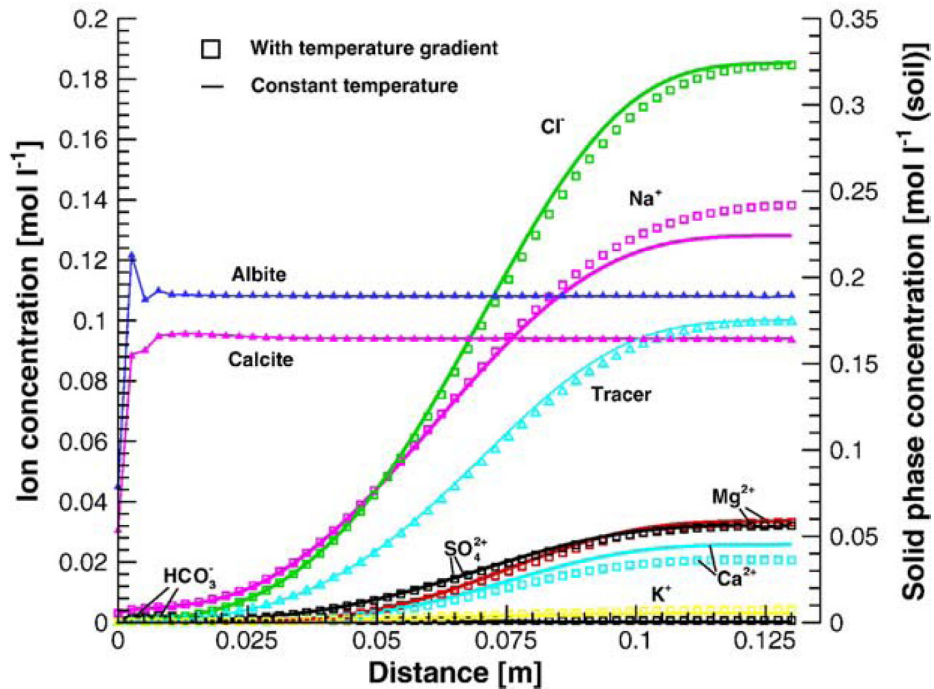
$$\log_{10} K = A_1 + A_2 T + \frac{A_3}{T} + A_4 \log_{10} T + \frac{A_5}{T^2} \quad (9.2)$$



**Abb. 9.1** Operatorsplitting Algorithmus für die reaktive Transportsimulation (GeoSys-PHREEQC)

Es konnte gezeigt werden, dass die Berücksichtigung temperaturabhängiger chemischer Reaktionen wichtig ist (Abb. 9.2).

Die programmtechnische Kopplung zwischen GeoSys und PHREEQC erfolgte durch Aufrufe (system calls) der ausführbaren PHREEQC Version (executable) nach jedem Transportschritt. Dies beeinträchtigte die Recheneffizienz im erheblichen Maße. Daher erfolgen neuere Kopplungen mit chemischen Simulatoren wie ChemApp, GEMS und BRNS mittels Bibliotheken oder direkt auf Quellcode-Ebene (s. Kap. 9.3.1).



**Abb. 9.2** Vergleich der Ionenverteilungen für iso- und nichtisotherme Bedingungen

### 9.2.2 Numerische Simulation unterschiedlicher Prozesse in HC-Prozess: Salz / SVV mit dem Programmsystem GeoSys/RockFlow

Um die Zuverlässigkeit der Simulationsergebnisse im geotechnischen Bereich zu verbessern sind thermische, hydraulische, mechanische und chemische (THMC) Prozesse sowie deren komplexe Kopplungsmechanismen zu berücksichtigen. Mit der Methoden- und Softwareentwicklung im Rahmen dieses Forschungsvorhabens werden Verfahren und Werkzeuge zur Verfügung gestellt, die laut Antrag zunächst eine Modellierung der in Bentoniten ablaufenden C:HM-Prozesse ermöglichen sollten.

Wie bereits erwähnt, wurde im Rahmen der in der Projektbesprechung vom 20.05.2008 vereinbarten Zieländerungen und Verschiebungen von Aufgaben innerhalb des Vorhabens C:HM u.a. vereinbart, dass ein Teil der Modellierung des Verhaltens von Steinsalz und SVV bzw. des Verbundes beider Materialien vom ZAG(UFZ) übernommen wird. Der TU Clausthal oblagen weitere Laborversuche zur Untersuchung des mechanischen Verhaltens von SVV sowie der Parameterabschätzung. Auf dieser Grundlage sollte insbesondere untersucht werden, ob das Programmsystem GeoSys/RockFlow prinzipiell geeignet ist, das gekoppelte C:HM-Verhalten von Salzgestein numerisch zu simulieren. Das bezieht sich ausdrücklich auch auf Versatzmaterialien, die dem Ver-

schluss von Strecken und Bohrlöchern im Wirtsgestein und damit der sicheren Abdichtung potenzieller Lagerstätten dienen. Wie bereits erwähnt waren die Fähigkeiten von GeoSys zur Modellierung von Mehrphasenflüssen ( $H^n$ ) in porösen Medien sowie die bereits nachgewiesenen Potenziale der Kopplung von GeoSys zu reaktiven Transportvorgängen (C) ausschlaggebend für diese Entscheidung. Einer Erweiterung bezüglich der konstitutiven Modelle für das spezifische Materialverhalten bedurften lediglich die Programmteile zur Simulation von Deformationsprozessen (M).

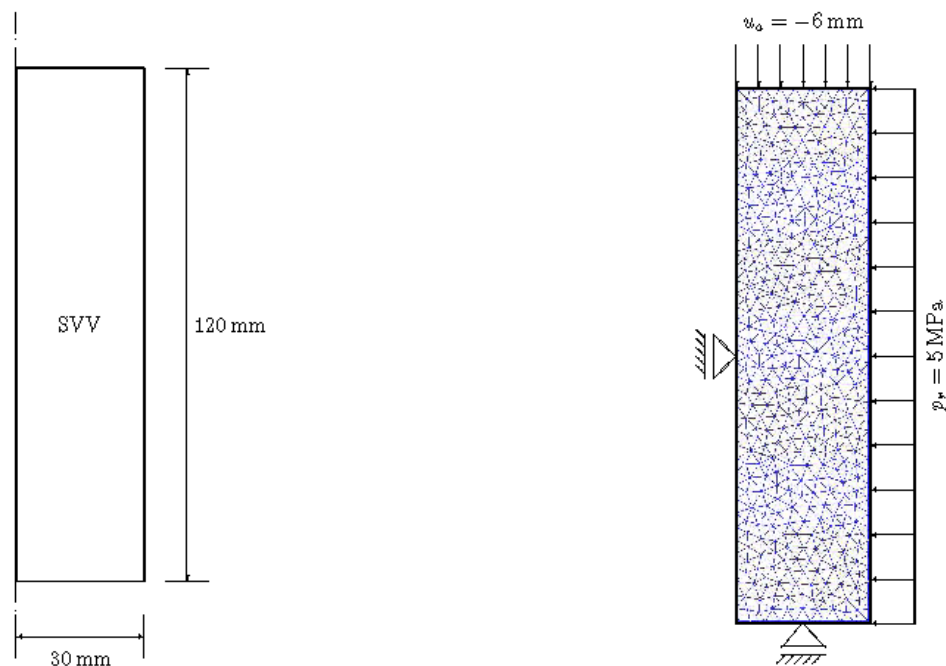
Die auf der Grundlage der theoretischen und experimentellen Studien der Projektpartner sowie eigener methodischer Arbeiten erzielten numerischen Ergebnisse werden im Folgenden kurz dargestellt. Dabei wird hinsichtlich des Deformationsverhaltens von SVV von weitreichenden Analogien zu Steinsalz ausgegangen, was die Verwendung für Steinsalz entwickelter Materialmodelle verwendet. Im Verlaufe der Projektbearbeitung zeigte sich, dass einzelne Effekte z. T. deutlich voneinander abweichen (z. B. Kompaktionsverhalten, siehe Kap. 3 und 4). Deren Berücksichtigung in GeoSys setzt lediglich eine unproblematische Modifikation der konstitutiven Ansätze voraus. Diese wurde in der Endphase der Projektbearbeitung nicht mehr vorgenommen, da es primär um die prinzipielle Eignung von GeoSys ging und, wie oben beschrieben, insbesondere wegen der starken Streuung der Versuchsergebnisse noch prinzipielle Fragen der Modellkalibrierung offen sind. In diesem Zusammenhang wird im Folgenden auch nicht der Versuch dargestellt, konkrete experimentelle Ergebnisse qualitativ exakt abzubilden. Der Schwerpunkt liegt vielmehr auf der qualitativ zweckmäßigen Beschreibung der wesentlichen Materialeffekte.

### **9.2.3 M-Prozess: Kriechen**

Für das Kurzzeitverhalten von Verschlussbauwerken unter Einsatz von SVV ist besonders dessen Quellverhalten von Interesse, das zur Ausbildung eines Kristallisationsdrucks auf das umgebende Gebirge und somit zu einem sicheren Verschluss beispielsweise von Bohrungen im Steinsalz führt. Das Langzeitverhalten von Steinsalz ist hingegen von ausgeprägten Kriechprozessen geprägt. Wie weiter oben erwähnt, werden bei SVV Kriechvorgänge durch ein markantes Kompaktionsverhalten überlagert, was eine separate Betrachtung dieser zeitabhängigen Prozesse erschwert. Ebenso sind Schädigungs- und Verheilungsvorgänge im Gestein für die Sicherheit der Lagerstätte relevant. Es existieren nur wenige Materialmodelle, die alle Aspekte des mechanischen Verhaltens von Steinsalz berücksichtigen. In diesem Zusammenhang sind

besonders die Untersuchungen von Lux und Hou von der TU Clausthal zu nennen. Für einen Literaturüberblick sei auf den Report von Görke et al. (2009) im Anhang verwiesen. Spezielle Materialmodelle für SVV existieren nicht. Vielmehr werden, basierend auf beobachteten Analogien im Werkstoffverhalten, hier die aus der Salzmechanik bekannten Modelle auch für SVV genutzt.

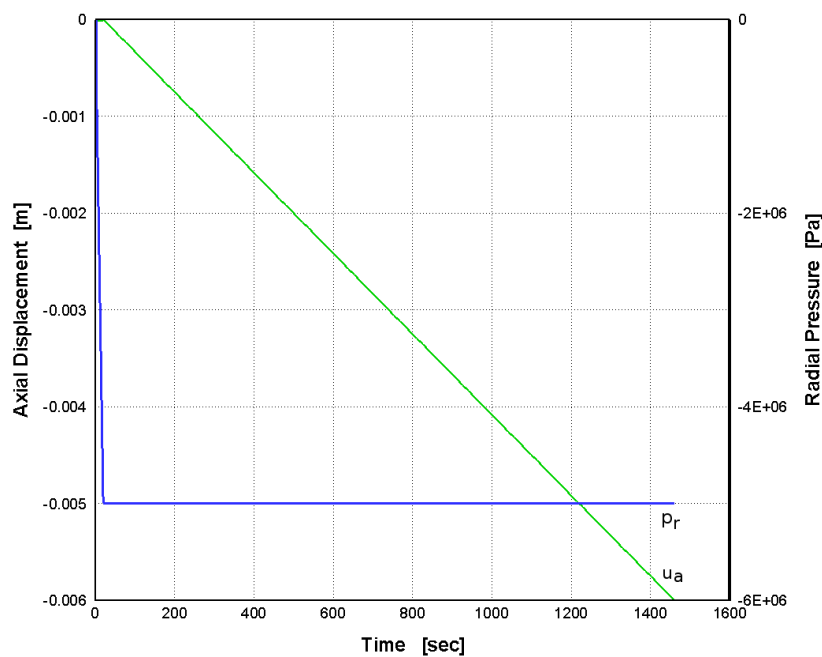
Zur Untersuchung der relevanten Materialphänomene und zur Kalibrierung zweckmäßiger Materialmodelle wurden an der TU Clausthal umfangreiche experimentelle Studien mit zylindrischen Probekörpern aus ausgehärtetem SVV durchgeführt (siehe Kap. 3 und 4). Dabei wurden vorrangig triaxiale Kompressionsversuche im Kurzzeit- und Langzeitbereich realisiert. Eines der Projektziele des ZAG(UFZ) bestand darin, das in den Experimenten beobachtete mechanische Verhalten als Teilvorgang gekoppelter C:HM-Prozesse zunächst separat zu simulieren. Diese Vorgehensweise ist Voraussetzung dafür, eine realistische Modellierung dieser Teilprozesse im Gesamtkontext zu gewährleisten.



**Abb. 9.3** Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV. Axialsymmetrisches Modell. Links: Geometrie. Rechts: Finite Element Gitter und Randbedingungen

In Abb. 9.3 sind die Geometrie, das Finite Element Gitter für die numerische Simulation sowie die Randbedingungen bezüglich eines axialsymmetrischen Modells der SVV-Probekörper dargestellt.

Im Rahmen der Kurzzeitversuche wurde zunächst ein radialer Manteldruck von 5 MPa auf die Proben aufgebracht. Danach erfolgte eine verschiebungsgesteuerte axiale Belastung, im Verlaufe derer die Proben um 6 mm gestaucht wurden. Das entspricht einer Verringerung der Probenhöhe um 5 % (vgl. Abb. 9.4).



**Abb. 9.4** Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV. Belastungsgeschichte für Kurzzeitversuche. Radialer Manteldruck mit nachfolgender Axialverschiebung (Verzerrungsgeschwindigkeit:  $\dot{\epsilon} = 4,17 \cdot 10^{-5} s^{-1}$ )

Die Kurzzeitversuche dienen unter anderem der Analyse elastischer Anteile des Materialverhaltens von Steinsalz bzw. SVV. Zu deren Modellierung kommt in der Literatur auch aktuell häufig noch das klassische Hookesche Gesetz der linearen Elastizität zum Ansatz. Demgegenüber wird an der TU Clausthal bereits seit etwa zwei Dekaden mit dem LUBBY1-Ansatz ein so genanntes pseudoelastisches Modell verwendet, das die bereits bei vergleichsweise kleinen Verzerrungen beobachteten Nichtlinearitäten im Spannungs-Dehnungs-Verlauf von Hauptachsen orientierter Belastung im Kurzzeitbereich deutlich realistischer abbildet (vgl. [LUX 84]). Auf dieser Grundlage wurde am ZAG(UFZ) für allgemeine Beanspruchungszustände ein Materialmodell der nichtlinea-

ren Elastizität entwickelt und in GeoSys implementiert, das dem klassischen Hookeschen Gesetz mit verzerrungsabhängigem Elastizitätsmodul

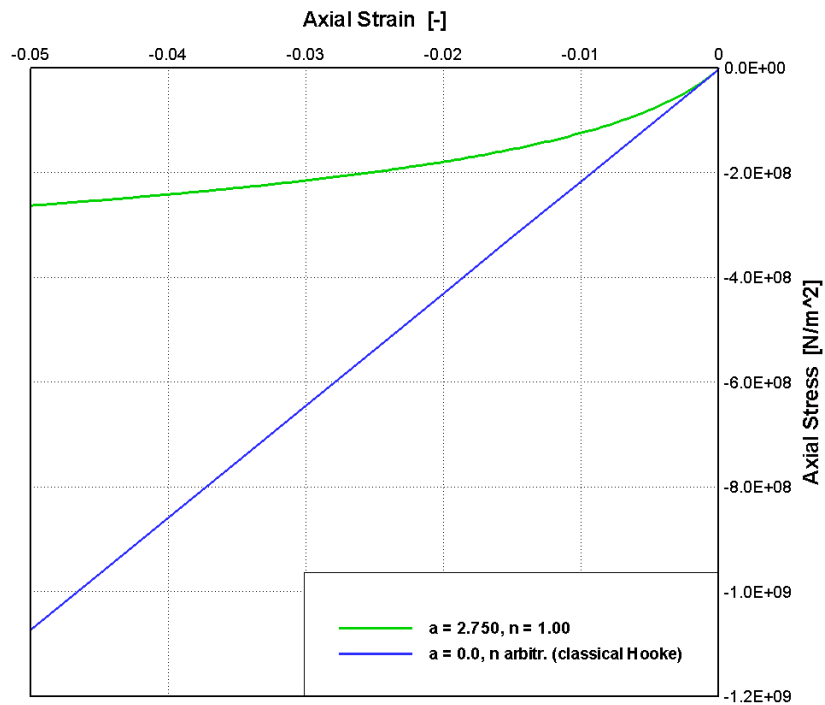
$$E(\varepsilon_v) = \frac{E_0}{1 + a \varepsilon_v^n} \quad (9.3)$$

entspricht. Während  $\varepsilon_v$  die Vergleichsdehnung darstellt, sind  $E_0$ ,  $a$  und  $n$  Materialparameter. Durch experimentelle Analysen gestützt wird die Querkontraktionszahl als konstant vorausgesetzt. Für die Darstellung von Modelldetails wird wiederum auf den Report von Görke et al. (2009) verwiesen.

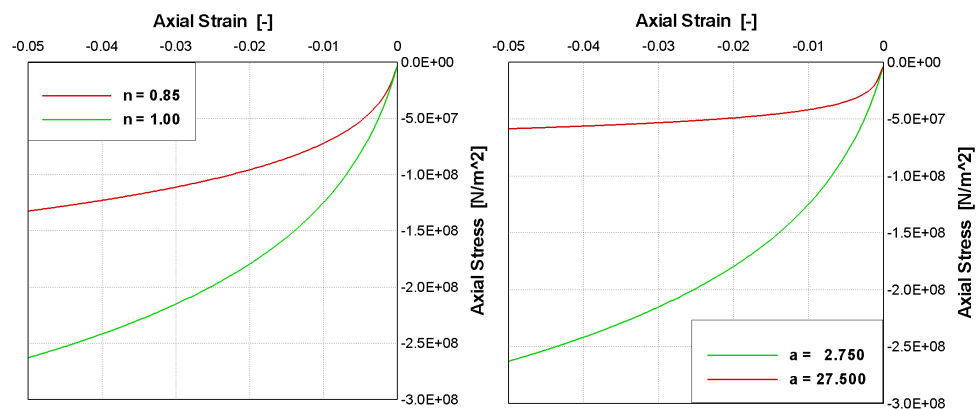
Die Untersuchungen an der TU Clausthal zeigten, dass ein gleichmäßiger Aufsättigungsprozess von SVV-Proben wegen der sehr kurzen Zeitskalen der dabei ablaufenden reaktiven Vorgänge außerordentlich schwierig zu realisieren ist. In der Folge kommt es zu starken lokalen Schwankungen der Materialeigenschaften ausgehärteter Proben, die sich in ebenso großen Variationen der global (bezüglich einer als homogen angenommenen Gesamtprobe) ermittelten Materialparameter manifestieren. Die für SVV ermittelten Werte des Anfangselastizitätsmoduls  $E_0$  schwanken zwischen 10,8 GPa und 32,0 GPa, bezüglich der Querkontraktionszahl  $\nu$  wurden Werte zwischen 0,26 und 0,41 ermittelt. Für die numerische Simulation wurden die Mittelwerte  $E_0 = 21,4$  GPa und  $\nu = 0,335$  verwendet. Wie ein Vergleich zeigt, liegen diese ebenso im Bereich der in der Literatur für Steinsalz angegebenen Daten:  $E_0 = 3,86$  GPa...48,0 GPa und  $\nu = 0,047$ ...0,35.

Die Spannungs-Dehnungs-Kurven in Abb. 9.5 zeigen an exemplarisch ausgewählten Materialparametern deutlich den Unterschied zwischen dem linearen und dem nichtlinearen Ansatz zur Modellierung des elastischen Anteils des Materialverhaltens von SVV. Mit dem klassischen Hookeschen Gesetz werden die Spannungen um ein Vielfaches überschätzt. Die Darstellungen in Abb. 9.6 vermitteln einen Eindruck davon, wie durch zweckmäßige Variation einzelner Materialparameter das reale Materialverhalten möglichst realistisch modelliert werden kann. Während mit dem Anfangs-Elastizitätsmodul  $E_0$  die Anfangssteifigkeit bei infinitesimal kleinen Verzerrungen erfasst wird, bieten die Parameter  $a$  und  $n$  die Möglichkeit, den berechneten Kurvenverlauf dem gemessenen möglichst genau anzupassen. Im konkreten Fall gewährleisteten die Werte  $a = 27500$  und  $n = 1,0$  die beste Approximation von an der TU Clausthal gemessenen Spannungs-Dehnungs-Kurven für das Kurzzeitverhalten von SVV.





**Abb. 9.5** Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV, Spannungs-Dehnungs-Kurve für die axiale Beanspruchung, Vergleich von linearem (Hooke) und nichtlinearem (LUBBY1) elastischem Materialmodell



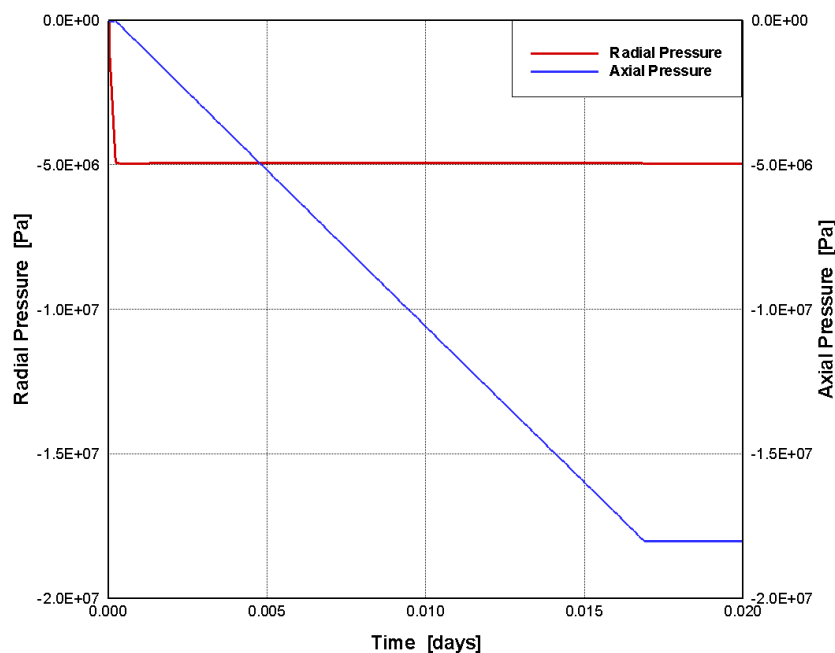
**Abb. 9.6** Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV. Spannungs-Dehnungs-Kurve für die axiale Beanspruchung, Nichtlinear-elastisches Materialmodell (LUBBY1), Einfluss unterschiedlicher Materialparameter zur Kalibrierung von Messkurven, Links:  $a = 2750 = \text{const}$ , Rechts:  $n = 1,0 = \text{const}$

Im Zusammenhang mit der Endlagerforschung wurden am UFZ Leipzig bereits in anderen Projekten Untersuchungen zum thermo-hydro-mechanischen (THM) Verhalten

von Steinsalz durchgeführt (vgl. [WAN 07a]). Dabei wurde im Zusammenhang mit dem für das Langzeitverhalten charakteristische Kriechen das so genannte BGR Modell zur Beschreibung eines temperaturabhängigen quasistationären Kriechverhaltens in das Programmsystem GeoSys implementiert und erfolgreich an ausgewählten Beispielen für Steinsalz und Salzgrus getestet. Dieser Ansatz stellt einen Zusammenhang zwischen der Rate der Kriechverzerrung  $\dot{\epsilon}^c$  und der Vergleichsspannung  $\sigma$  sowie der Temperatur  $T$  her (vgl. [HUN 94]):

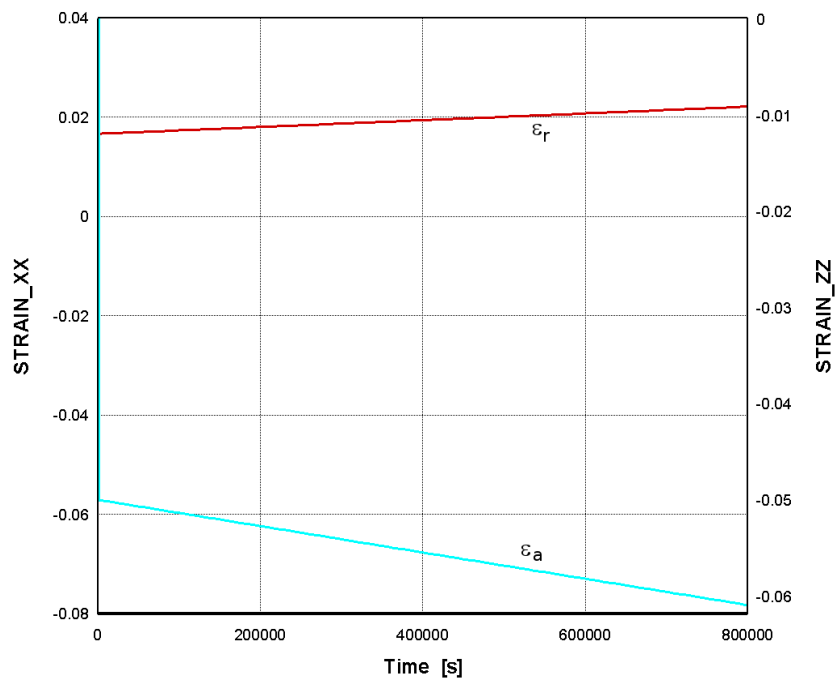
$$\dot{\epsilon}^c = A \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \left(\frac{\sigma}{\sigma^*}\right)^n \quad (9.4)$$

Hierbei ist  $R$  die universelle Gaskonstante,  $A$ ,  $Q$ ,  $n$  und  $\sigma^*$  sind Materialparameter. Die Belastungsgeschichte für die Untersuchung des Langzeitverhaltens ausgehärteter SVV-Proben in triaxialen Kompressionsversuchen ist in Abb. 9.7 dargestellt. Im Unterschied zu den Kurzzeitversuchen wurde hier lediglich die sekundäre axiale Belastung lastgesteuert aufgebracht.



**Abb. 9.7** Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV, Belastungsgeschichte für Langzeitkriechverhalten. Radialer Manteldruck mit nachfolgender Druckbelastung in axialer Richtung (jeweils für weitere 20 Tage konstant)

Der BGR-Ansatz kann instationäre Kriechprozesse lediglich bezüglich eines zeitlich veränderlichen Temperaturverlaufs modellieren. Da bei den Langzeitversuchen mit SVV-Proben die Temperatur weitgehend konstant gehalten wurde und das BGR-Modell bezüglich der (konstant gehaltenen) Spannung stationäre Vorgänge erfasst, werden mit diesem Ansatz lineare Verläufe der Komponenten des Verzerrungstensors über der Zeit ermittelt (vgl. Abb. 3.4). Als Materialparameter wurden aus den Versuchen folgende Werte ermittelt:  $T = 293 \text{ K}$ ,  $A = 1,8 \cdot 10^{-7} \text{ day}^{-1}$ ,  $Q = 54 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $n = 5$  und  $\sigma^* = 1 \text{ MPa}$ .

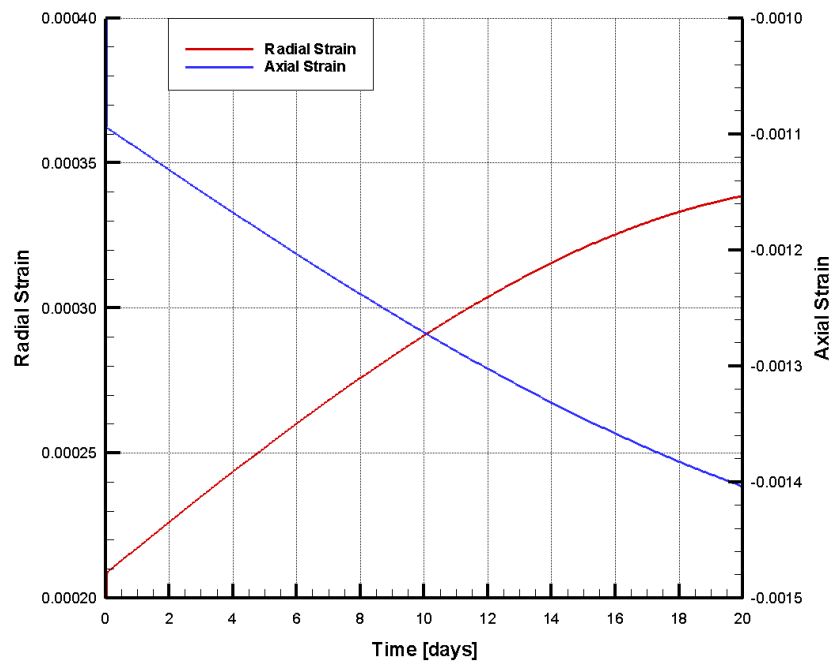


**Abb. 9.8** Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV, Simulation des Kriechverhaltens mit dem BGR-Modell (stationäres Kriechen)

Wie bereits für Steinsalz aus der Literatur allgemein bekannt, wurde auch für die ausgehärteten SVV-Proben in den triaxialen Langzeitkompressionsversuchen an der TU Clausthal ein instationäres Kriechverhalten unter isothermen Bedingungen ermittelt. Zur Beschreibung dieser Vorgänge wurde in GeoSys wesentliche Teile des von Lux und Hou an der TU Clausthal entwickelten inelastischen Materialmodells implementiert. In diesem Zusammenhang gilt für die Zeitableitung eines viskoplastischen Verzerrungsmaßes (Kriechrate) die Beziehung:

$$\dot{\epsilon}^{vp} = \frac{3}{2} \left[ \frac{1}{\eta_k} \left( 1 - \frac{\epsilon^{tr}}{\max \epsilon^{tr}} \right) + \frac{1}{\eta_m} \right] \frac{1}{1-D} \mathbf{s} \quad (9.5)$$

Dieser Ansatz, in der Literatur als LUBBY2-Modell bekannt, beschreibt das Kriechverhalten in sich überlagernden transienten und stationären Anteilen. Auf die detaillierte Erläuterung der einzelnen Variablen in obiger Beziehung sowie die Gleichungen für deren temperatur- und spannungsabhängige Entwicklung wird hier verzichtet. Es wird hierzu erneut auf den Report von Görke et al. (2009) im Anhang verwiesen, der auch die Angabe weiterer Quellen enthält. Mit den Materialparametern  $\bar{\eta}_m^* = 1,09 \cdot 10^{-7} \text{ MPa} \cdot \text{day}$ ,  $m = -0,219 \text{ MPa}^{-1}$ ,  $l = 0 \text{ K}^{-1}$ ,  $\bar{\eta}_k^* = 1,45 \cdot 10^5 \text{ MPa} \cdot \text{day}$ ,  $k_2 = -0,121 \text{ MPa}^{-1}$ ,  $\bar{G}_k^* = 7,0 \cdot 10^{-4} \text{ MPa}$ ,  $k_1 = -0,146 \text{ MPa}^{-1}$  und  $T = 293 \text{ K}$  für den LUBBY2-Ansatz konnte das experimentell beobachtete transiente Kriechverhalten von SVV qualitativ zutreffend modelliert werden. Die Parameter wurden an der TU Clausthal für Steinsalz experimentell ermittelt. Entsprechende Werte für SVV liegen derzeit nicht vor. Es soll jedoch erneut unterstrichen werden, dass die Ähnlichkeit des Materialverhaltens von Steinsalz und SVV diese Vorgehensweise rechtfertigt, wenn prinzipielle Untersuchungen zum konstitutiven Verhalten der Materialien im Mittelpunkt stehen.



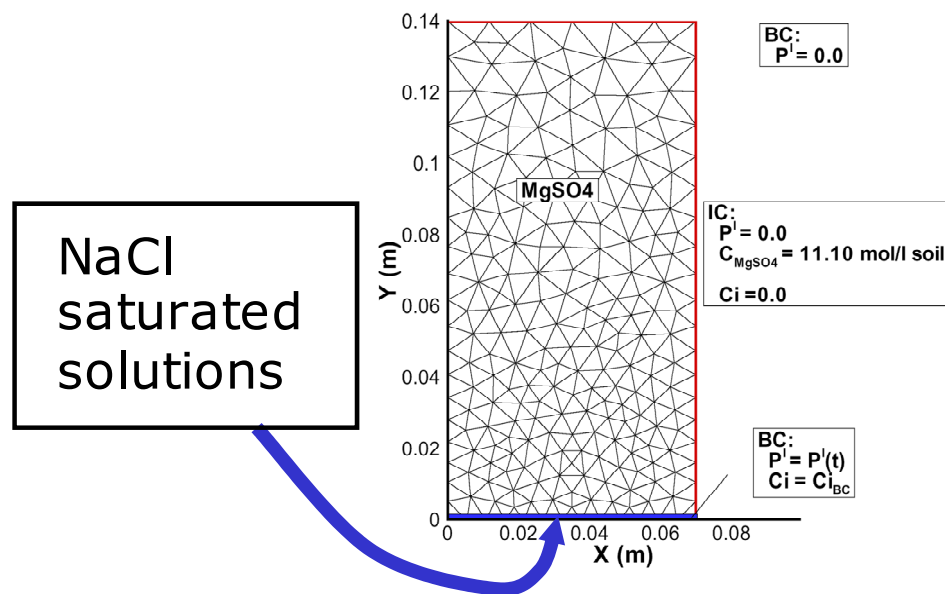
**Abb. 9.9** Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV, Simulation des Kriechverhaltens mit dem LUBBY2-Modell ohne Schädigung (transientes und stationäres Kriechen)

Mit der Modifikation, Entwicklung und Implementierung von konstitutiven Beziehungen zur Modellierung des nichtlinear-elastischen und des viskoplastischen (stationäres und

transientes Kriechen) Materialverhaltens von Steinsalz und selbst verheilendem Versatz (SVV) wurden die Voraussetzungen geschaffen, die mechanischen Vorgänge gekoppelter C:HM-Prozesse in Reservoiren im Salzgebirge qualitativ zutreffend mit GeoSys zu berechnen. Damit liegen die Modelle und Werkzeuge für die numerische Simulation von Lagerstättenbauwerken vor. Die quantitativ realistische Modellierung von Labor- und Feldstudien ist an die zuverlässige Kalibrierung der Materialmodelle aus experimentellen Daten geknüpft.

#### 9.2.4 C:HM-Prozess: Modellierung des Zutritts gesättigter Salzlösung zu anfänglich trockenem SVV

Für die Modellierung des Zutritts einer gesättigten NaCl-Lösung zu einem SVV-Prüfkörper wurde das in Abb. 9.10 skizzierte 2D-Modell aufgestellt. Es wurde vereinfachend angenommen, dass während des gesamten modellierten Prozesses an allen Punkten des Modells Standard-Temperatur und -Druck herrschten.



**Abb. 9.10** 2D-Modell für die Modellierung des reaktiven Stofftransports in einem SVV-Prüfkörper

Die Anfangsporosität wurde angenommen mit 0,502. Die Anfangs-Permeabilität ist damit sehr hoch entsprechend  $1,0 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$ . Selbst mit sehr niedrigen Fluidrücken wird daher die Lösung am Anfang sehr schnell in das Modellgebiet eindringen und den

gesamten Porenraum fluten. Daher wurde angenommen, dass im ersten Zeitschritt gesättigte Bedingungen im gesamten Porenraum vorherrschten.

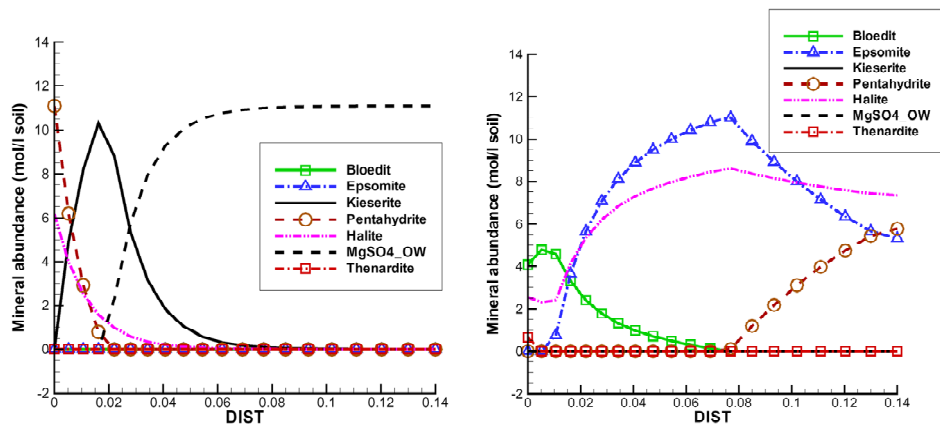
Weitere Anfangsbedingungen waren:

- Lösungsdruck = 0 für die gesamte Probe;
- Die Raumkonzentration von wasserfreiem  $\text{MgSO}_4$  betrug  $11,10 \text{ mol/dm}^3$ . Es lagen keine weiteren Komponenten vor (insbesondere also keine Lösung);
- Die Modellierung begann damit, dass gesättigte NaCl-Lösung von der Unterseite in den Probenraum injiziert wurde, wobei der Injektionsdruck über die Zeit erhöht wurde. Die Injektionsdruck-Erhöhung war eine Randbedingung für alle folgenden Zeitschritte.

In der Anfangsphase löst sich  $\text{MgSO}_4$  auf und es fällt NaCl aus. Tatsächlich konnte eine partielle Anlösung durchströmter SVV-Prüfkörper auch in den Experimenten beobachtet werden. Im weiteren Verlauf zeigt die Modellierung die Bildung der Phasen Kieserit, Pentahydrat, Hexahydrat, Epsomit und Blödit an. Dies steht ebenfalls in Übereinstimmung mit experimentellen Befunden.

Abweichend zu experimentellen Befunden wird nicht die Bildung von Starkeyit berechnet, was allerdings auf kinetische Gründe zurückgeführt werden kann. Auch die im Experiment beobachtete Bildung von präferentiellen Fließpfaden, die vollständig mit NaCl verschlossen sind, konnte naturgemäß nicht berechnet werden, da im Modell von einem homogenen Porenraum ausgegangen wurde.

Die zeitliche Entwicklung des Mineralphasenbestandes im durchströmten Prüfkörper ist für einzelnen Sektionen in Abb. 9.11 dargestellt. Naturgemäß dominiert in einem frühen Stadium (links) das wasserärmere Kieserit. Wasserfreies  $\text{MgSO}_4$  tritt an der Zuflussseite nicht mehr auf. Wird die Durchströmung weitergeführt (rechts), verschwindet das Kieserit zugunsten wasserreicherer  $\text{MgSO}_4$ -Phasen und wasserfreies  $\text{MgSO}_4$  ist völlig verschwunden. Letzterer Umstand entspricht ebenfalls nicht experimentellen Befunden, bei denen in ausreagierten SVV-Prüfkörpern stets auch unreaktiertes SVV (sprich: wasserfreies  $\text{MgSO}_4$ ) identifiziert wurde.



**Abb. 9.11** Modellierter zeitliche Entwicklung des Mineralphasenbestandes im durchströmten Prüfkörper

Als eine Konsequenz der Neubildung von Mineralphasen nimmt das Kornvolumen zu und die Porosität nimmt ab. Dies führt zu einer Herabsetzung der Permeabilität. Zur Orientierung sind in Tab. 9.1 die Molvolumina aller beteiligten Mineralphasen zusammengestellt.

**Tab. 9.1** Mineralphasen, die sich bei der Umsetzung von SVV mit gesättigter NaCl-Lösung bilden können und ihre Molvolumina

| Phase             | Summenformel   | Molvolumen [cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> ] |
|-------------------|--|---|
| Blödit            | Na <sub>2</sub> Mg(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O | 149,98  |
| MgSO <sub>4</sub> | MgSO <sub>4</sub>  | 45,25   |
| Kieserit          | MgSO <sub>4</sub> ·1H <sub>2</sub> O                                 | 56,60   |
| Starkeyit         | MgSO <sub>4</sub> ·4H <sub>2</sub> O                                 | 95,74   |
| Pentahydrat       | MgSO <sub>4</sub> ·5H <sub>2</sub> O                                 | 110,76  |
| Hexahydrat        | MgSO <sub>4</sub> ·6H <sub>2</sub> O                                 | 132,58  |
| Epsomit           | MgSO <sub>4</sub> ·7H <sub>2</sub> O                                 | 146,80  |
| Halit             | NaCl   | 27,02   |
| Thenardit         | Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>                                      | 53,33   |

Im Lichte anderer, im Verlaufe dieses Verbundvorhabens gewonnener Erkenntnisse, ist es wichtig hervorzuheben, dass die experimentell abgesicherte, sehr niedrige Permeabilität ausreagerter SVV-Prüfkörper nicht notwendigerweise voraussetzt, dass keine Poren mehr vorliegen. Betrachtungen zu den theoretisch denkbaren Reaktionsvolumina legen aber den Schluss nahe, dass die verbleibenden Poren hydraulisch nicht miteinander verbunden sind.

### **9.3 Softwareentwicklung**

Die Programmentwicklung zur Modellierung hydro-mechanisch-chemischer Prozesse hat einen großen Raum im Rahmen des Vorhabens eingenommen. Entsprechend des Arbeitsplanes ging es dabei um die Implementierung neuer konstitutiver Stoffmodelle, Schnittstellen zwischen verschiedenen Programmsystemen, die Weiterentwicklung numerischer Modelle insbesondere für gekoppelte Prozesse sowie die Modellverifizierung durch Benchmarking und Codevergleiche.

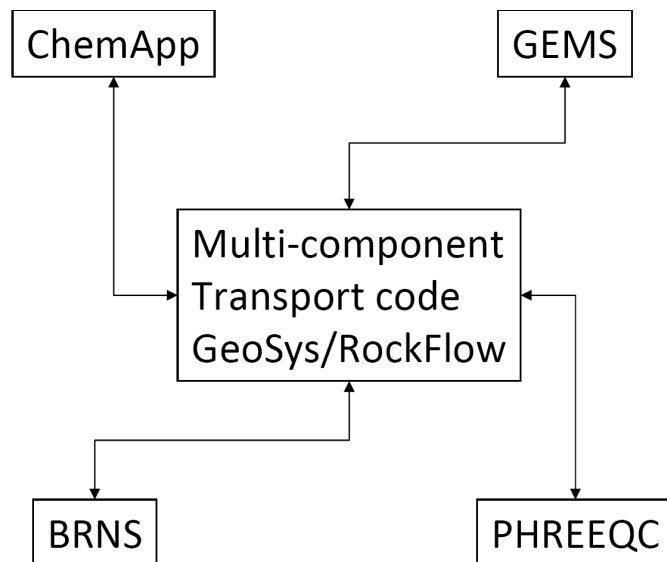
#### **9.3.1 Reaktiver Transport**

Als besonders wichtig für die Modellierung reaktiver Transportprozesse hat sich die Strategie erwiesen, (auch im Rahmen anderer Vorhaben) Schnittstellen zu mehreren chemischen Simulatoren zu entwickeln. Abb. 9.12 zeigt eine Übersicht der existierenden Kopplungen zu chemischen Simulatoren. Bei GEMS (entwickelt vom Paul-Scherrer-Institut, PSI, in der Schweiz) und ChemApp (kommerzieller Code) handelt es sich um thermodynamisch basierte Programme, die auf dem Prinzip der Minimierung der Gibbs Energie beruhen. PHREEQC (Parkhurst) ist ein Standardcode auf der Basis des Massenwirkungsgesetzes. BRNS ist biogeochemischer Simulator mit Spezialisierung auf kinetische Reaktionsprozesse. Die softwaretechnische Kopplung ist unterschiedlich, während die PHREEQC Kopplung auf Dateienaustausch beruht, erfolgt die Einbindung von ChemApp und BRNS als Laufzeitbibliothek. GEMS und GeoSys sind auf der Quellcode-Ebene gekoppelt (Abb. 9.12). Dies ermöglichte z. B. die Parallelisierung von GeoSysGEMS für die Simulation auf Mehrprozessor-Maschinen.

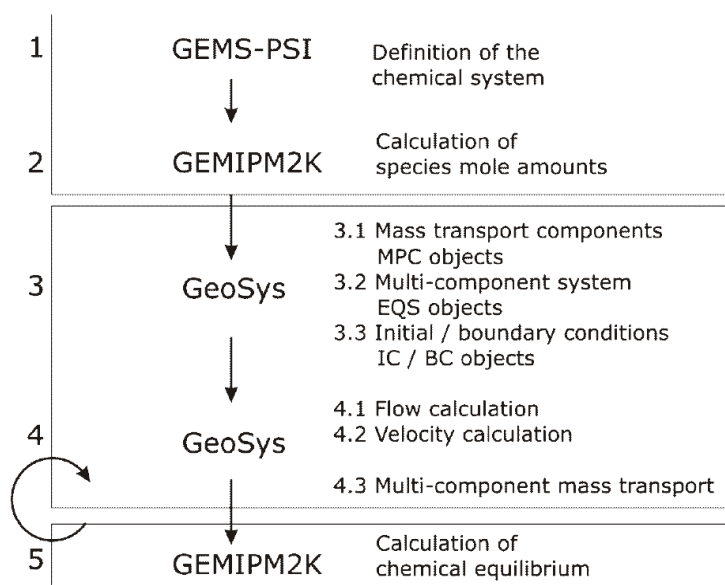
Das Kopplungsschema zwischen GeoSys und GEMS auf der Quellcode-Ebene ist in Abb. 9.13 dargestellt.

Erste Ergebnisse zur Modellierung von Porositätsänderungen infolge geochemischer Prozesse mit GeoSysGEMS sind in Kosakowski et al. (2009) [KOS 09] dargestellt.





**Abb. 9.12** GeoSys-Kopplungen mit chemischen Simulatoren

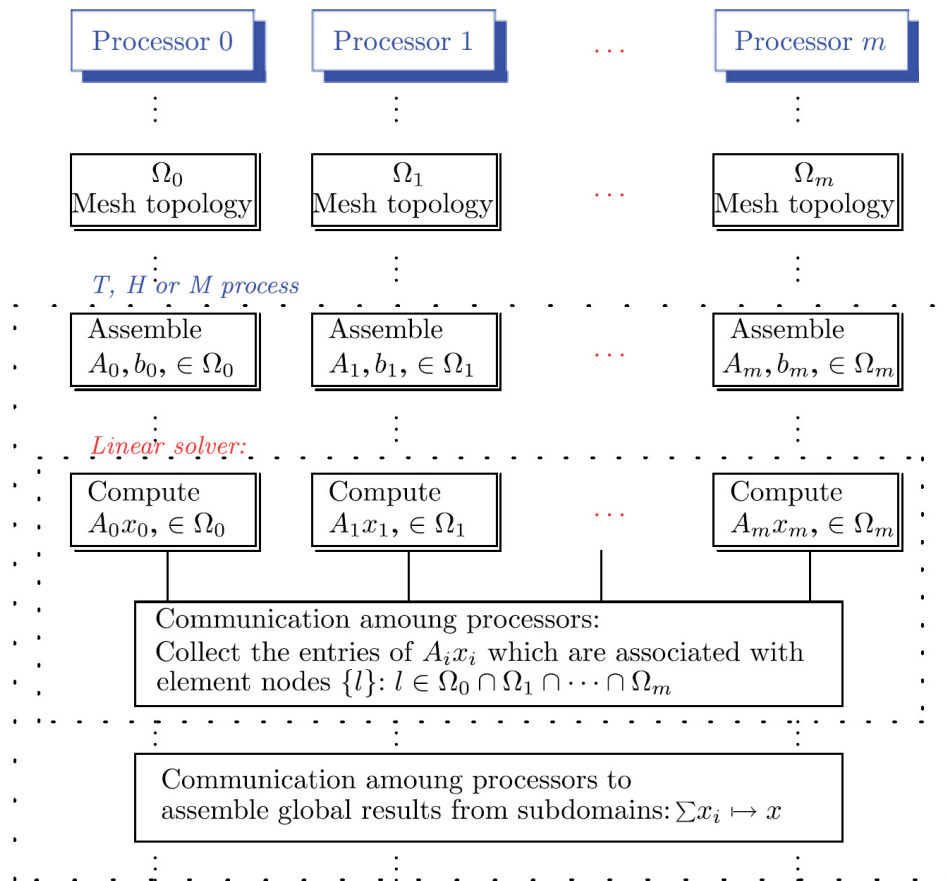


**Abb. 9.13** Kopplungsschema von GeoSysGEMS (auf Quellcode-Ebene)

### 9.3.2 Parallelisierung

Die Parallelisierung von GeoSys ist eine wichtige Voraussetzung, um THMC gekoppelte Prozesse in Natursystemen rechnen zu können. Für 3-D THM gekoppelte Anwendungen müssen 5 Feldgleichungen simultan gelöst werden [WAN 07a]. Die Parallelisierung von GeoSys erfolgt in mehreren Schritten. In der Abb. 9.14 ist das prinzipielle

Schema einer Parallelisierung mittels MPI auf der Basis der Gebietezerlegungsmethode (domain decomposition) dargestellt. Auf dieser Basis konnten erstmals 3-D THM Simulationen für Endlagerszenarien im Rahmen des DECOVALEX Projekts berechnet werden ([WAN 09b]).



**Abb. 9.14** Schema der parallelen finiten Elemente Methode

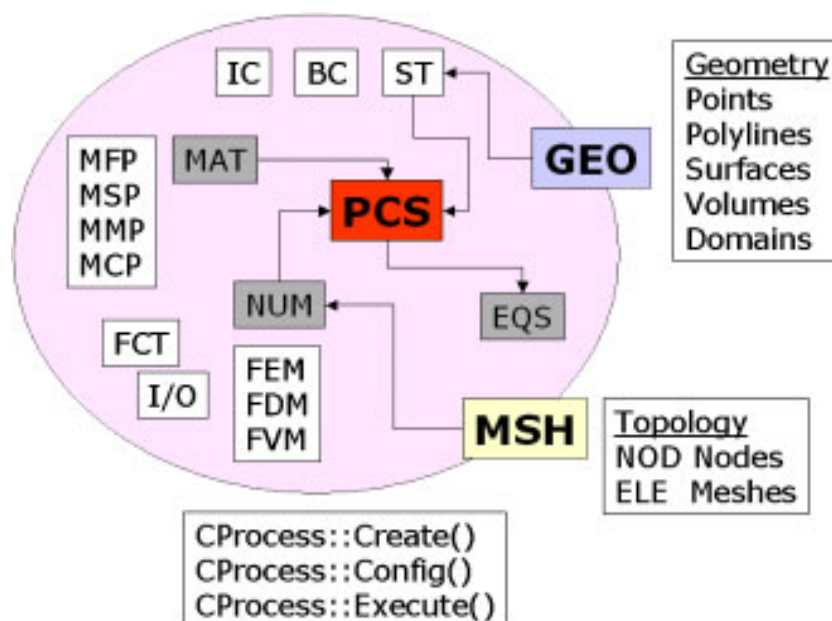
Nach den ersten Erfahrungen mit der parallelen GeoSys Version hat sich gezeigt, dass weitere Optimierungen notwendig waren, um die parallele Effizienz zu verbessern, wie z. B. die Implementierung sog. Sparse Objects (Matrizenspeicherung mit minimalem Speicherbedarf und extrem schnellen Zugriffen auf Matrizendaten, [WAN 09a]).

Die numerische Simulation chemischer Prozesse stellt noch höhere Anforderungen an den Rechenbedarf, da neben den Strömungsgleichungen noch eine große Zahl von Gleichungen für den Mehrkomponententransport zu lösen sind, z. B. über 20 für die reaktiven Transportbeispiele (s. Kap. 9.4). Die Parallelisierung reaktiver Mehrkomponenten-Transport-Modelle profitiert von der bereits implementierten MPI Methode für die Gebietszerlegung sowie von der Objekt-Orientierung der wissenschaftlichen Soft-

ware GeoSys. Voraussetzung für eine optimale Parallelisierung von THMC Modellen ist die Verfügbarkeit des Quellcodes für alle Komponenten. Dies ist z. Z. nur für GeoSysGEMS der Fall.

### 9.3.3 Gekoppelte Prozesse

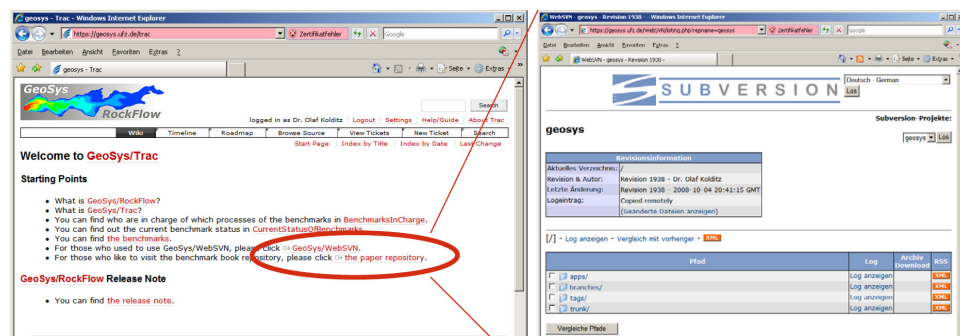
In der Einleitung wurde bereits erwähnt, dass zu Beginn des Vorhabens eine wichtige Versionsänderung von GeoSys-3 auf GeoSys/GeoSys-4 stattgefunden hat. Dabei erfolgte eine Reimplementierung in der Programmiersprache C++. Durch die objektorientierte Reimplementierung konnte der Quellcode von ca. 10 MB (GeoSys-3) auf 3 MB (GeoSys/GeoSys-4) reduziert werden ([KOL 04]). Dies garantiert eine erhebliche Verbesserung in der Weiterentwickelbarkeit des Finite-Elemente-Modells. Einer der Auslöser für die konsequente Objektorientierung war eine optimale Modellierung streng gekoppelter Prozesse. In der Abb. 9.15 ist das Schema für sogenannte Prozess-(PCS)-Objekte dargestellt. Die Grundidee ist, dass zur Simulation von T-H-M-C Prozessen, unabhängig vom speziellen Typ, immer der gleiche numerische Algorithmus ausgeführt wird. Daher wurde eine entsprechende Basis-Klasse „CProcess“ entwickelt, von der die spezifischen T-H-M-C Prozesse abgeleitet werden.



**Abb. 9.15** GeoSys-Prozess Objekte

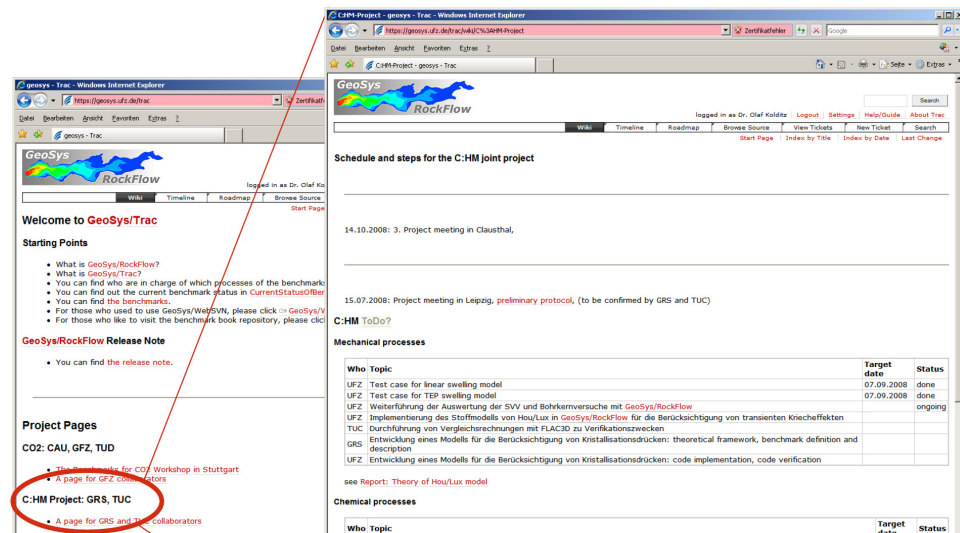
### 9.3.4 Software- und Projektmanagement

Beginnend mit dem Jahr 2007 wurde für die GeoSys-Entwicklung durch Dr. Park ein neues Softwaremanagementsystem eingeführt. Dabei handelt es sich um ein Wikipedia, in das ein Versionsmanagement (SubVersion) eingebettet ist (Abb. 9.16). Der Wikipedia-Teil eignet sich in hervorragender Weise für einen (nachhaltigen) Informationsaustausch, als Diskussionsforum für mehrere Partner, Ablage von Dokumenten. In dem Versionsmanagement werden Quellcode (Releases), Testbeispiele und Benchmarkbuch ([KOL 09]) verwaltet und archiviert. Der Zugriff erfolgt über eine (secured) WebSeite (<https://GeoSys.ufz.de>). Der Zugriff ist geschützt über eine sogenannte Zertifizierung, d. h. eine personengebundene verschlüsselte Datei muss in den WebBrowser geladen werden, um Zugriff auf die GeoSys-Seite zu bekommen. Derzeit haben über 60 Personen aus fast zehn Einrichtungen (aus 4 Ländern BRD, Schweiz, UK, Frankreich) derartige Zugriffszertifikate und können sich aktiv an dem OpenSource GeoSys-Projekt beteiligen. Voraussetzung für die Vergabe eines Zugriffszertifikats ist die Zustimmung zu den Regeln guten wissenschaftlichen Arbeitens. Das OpenSource GeoSys-Projekt wird zunächst bis Ende 2009 getestet (Gültigkeitsdauer laufender Zertifikate). Bei etwaigem Missbrauch kann eine sofortige Löschung aller externen Zertifikate erfolgen.



**Abb. 9.16** Verknüpfung des GeoSys-Wikipedia mit dem SubVersion System zum Software-Management

Das GeoSys-Wikipedia wurde in der letzten Projektphase auch für das C:HM Projekt eingesetzt, die GRS Braunschweig und die TU Clausthal verfügen über entsprechende Zugriffszertifikate (Abb. 9.17).



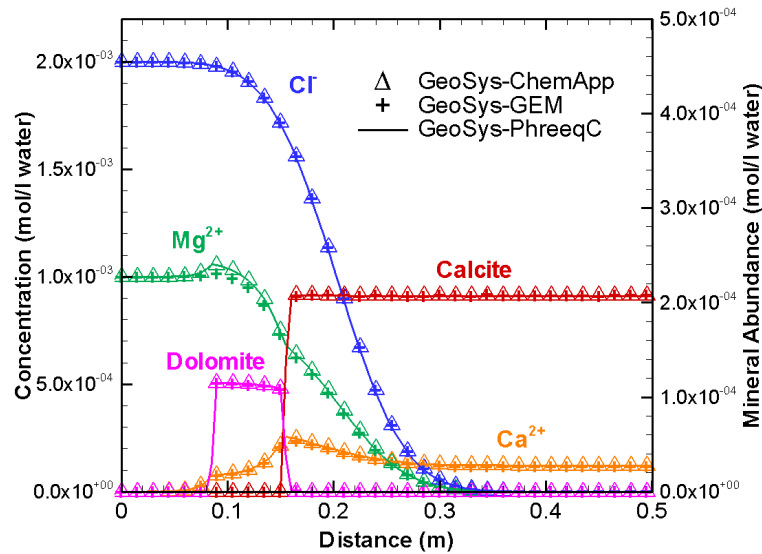
**Abb. 9.17** Einsatz des GeoSys-Wikipedia zum Projektmanagement

## 9.4 Benchmarking und Anwendungen

Die Testbeispiele wurden systematisch im Developer-Benchmark-Buch (DBB) beschrieben. Die im DBB aufgeführten Beispiele werden zum Testen neuer GeoSys-Versionen benutzt. Das DBB ist Bestandteil des Versionsmanagementsystems. Die Abschnitte sind Auszüge aus dem aktuellen DBB.

### 9.4.1 Lösungs- und Fällungsreaktionen

Mit dem Testbeispiel 8.4.5 werden alle Kopplungen mit den geochemischen Simulatoren PHREEQC, ChemApp und GEMS geprüft. Die Code-Vergleiche sind in Abb. 9.18 zusammengestellt und zeigen eine gute Übereinstimmung.



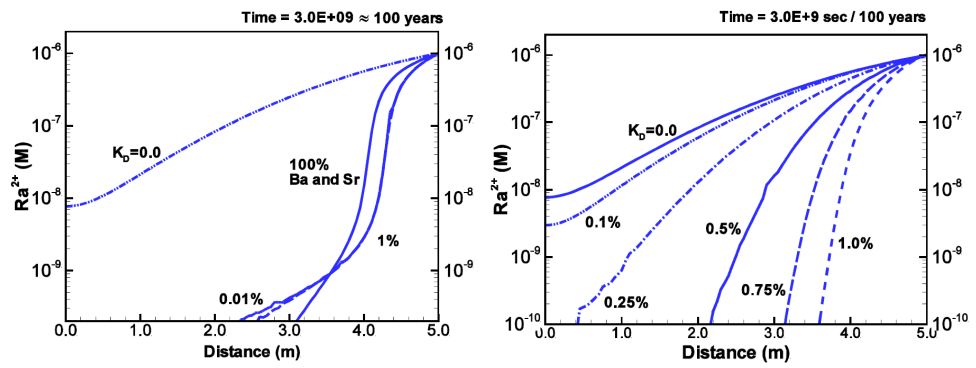
**Abb. 9.18** Code-Vergleiche GeoSys-PHREEQC, ChemApp, GEMS

#### 9.4.2 Festphasen-Lösungen

Shao et al. ([SHA 09]) untersuchen den Einfluss der Bildung von Festphasen-Lösungen (solid solutions) auf das Rückhaltevermögen von Bentoniten auf die Ausbreitung von Radiumnukliden. Für diese Studie wurde der reaktive Transport-Code GeoSysGEMS eingesetzt.

Abb. 9.19 (links) illustriert die Sensitivität des Retardationseffekts bezüglich der verfügbaren Mengen von Barium und Strontium. Die durchgezogenen Kurven zeigen die berechneten  $\text{Ra}^{2+}$  Konzentrationen mit verschiedenen Barium und Strontiumgehalten (100 %, 1 %, und 0,01 %). Die gestrichelte Linie den Vergleich mit der analytischen Lösung für das KD Konzept. Die Abb. 9.19 (rechts) zeigt den Retardationseffekt in Abhängigkeit der Verfügbarkeit von Sulfat. In den Berechnungen wurden verschiedene Anfangsgehalte von Gips im Verhältnis zu Kalzit (1 %, 0,75 %, 0,5 %, 0,25 % und 0,1 %) in der Feststoffphase des Puffermaterials angenommen.

Die Ergebnisse zeigen, dass die Bildung von Festphasen-Lösungen (solid solutions) das Radium-Rückhaltevermögen von Bentoniten verbessert. KD Lösungen beschreiben das Rückhaltevermögen nur ungenau und müssen kalibriert werden. Für ein besseres Verständnis der Funktionsweise von geotechnischen Barrieren sollten diese geochemischen Prozesse daher berücksichtigt werden.



**Abb. 9.19** Rückhaltevermögen in Abhängigkeit von Barium- und Strontiummengen (links) sowie Sulfat (rechts), dargestellt sind die Radiumverteilungen in Abhängigkeit vom Abstand von der Nuklidquelle ( $x = 5$  m)





## 10 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel des aus drei Teilprojekten bestehenden Verbundvorhabens mit dem Titel Koppelung numerischer Modelle für C:HM-Transportprozesse (Kurztitel: C:HM Prozesse) war es zu prüfen, inwieweit existierende Computerprogramme C:HM gekoppelte Prozesse in einfachen Modellsystemen simulieren können. Für experimentelle Untersuchungen sind die Randbedingungen der untersuchten Prozesse sowie die Parameter der verwendeten Materialien im Labor besser bekannt bzw. präziser einstellbar, als in vergleichbaren geotechnischen Verschlussbauwerken. Vor diesem Hintergrund wurden im Hinblick auf die physikochemische Modellierung und die Verifikation der eingesetzten Software zahlreiche Laborversuche durchgeführt und mit den ermittelten Parametern numerisch analysiert.

Im ersten Teilprojekt *Laborversuche und Geochemische Modellierung* (GRS) wurden Experimente mit aufgereinigtem, homoionischen Montmorillonit und binären Lösungen realisiert. Ferner wurden, als größtmögliche, im Labormaßstab realisierbare Annäherung an in-situ-Verhältnisse, mehrere Versuche mit axial gelochten und mit wasserfreiem SVV verfüllten Großbohrkernen durchgeführt, bei denen diese mit gesättigter NaCl-Lösung aufgesättigt wurden. Bei den Versuchen mit Montmorillonit wurde Wert auf die Einhaltung genügend langer Wartezeiten gelegt, um nach Möglichkeit Gleichgewichtszustände zu betrachten.

Die Simulationen der Bentonit-Versuche wurden mit GeoSys/RockFlow durchgeführt. Das einzige von insgesamt drei implementierten Modellen für die Simulation der Auf-sättigung und der Quellung von Bentoniten, das chemische Effekte berücksichtigte, konnte die Beziehung zwischen Quelldruck und Ionenstärke zwar im Trend nachvollziehen, zeigte bei niedrigeren Ionenstärken jedoch Schwächen und konnte insbesondere die durch eine Änderung der Lösungszusammensetzung, bei ansonsten fast gleich bleibender Ionenstärke, induzierte Änderung des Quelldrucks nicht abbilden. Das sehr unterschiedliche Quellverhalten von unterschiedlich getrockneten Materialien wies zudem auf einen in den verwendeten Modellen bisher nicht berücksichtigten Einfluss der Makrostruktur des Bentonits hin.

Im zweiten Teilprojekt *Gekoppelte Modellierung des C:HM-Verhaltens von selbstverheilendem Salzversatz* (TUC) sind die Möglichkeiten einer Modellierung von C:HM-

Prozessen am Beispiel von SVV untersucht worden. Laboruntersuchungen an SVV-Prüfkörpern, die analog zum Einsatz von SVV in einem Bohrlochverschlussbauwerk durch künstliche Aufsättigung hergestellt wurden, zeigten, dass zumindest in diesem Größenmaßstab die Materialstruktur sehr inhomogen sein kann und dass die Materialeigenschaften sehr großen Streubreiten unterliegen. Aus diesem Grund ist die ursprünglich vor dem Wechsel der Teilprojektleitung im Forschungsantrag geplante numerische Simulation des Aushärtungsprozesses von SVV über eine C:HM-Kopplung (indirekte Kopplung ohne Hydratisierungsgrad) mit dem verfügbaren Instrumentarium nicht realisierbar gewesen. Die Ursache hierfür wird durch den Vergleich zweier vom Ansatz her unterschiedlicher Simulationen verdeutlicht: Die Berechnungsergebnisse einer so genannten „ideal homogenen“ Aufsättigung (die hydraulischen Prozesse laufen instantan und damit unabhängig von den chemischen ab, vgl. Kap. 5.1.3) erwiesen sich dabei als wenig realistisch. Im Gegensatz dazu zeigten die Resultate der so genannten „ideal inhomogenen Simulation“ des Aufsättigungsprozesses (hier laufen die chemischen Prozesse instantan und damit unabhängig von den hydraulischen ab, siehe Kap. 5.1.4) Übereinstimmung mit der Realität bezüglich der Verteilung der Mineralphasen und der Volumenausbildung. Die Berechnungsergebnisse belegten jedoch auch, dass die zeitliche und örtliche Verteilung der Entwicklung von Mineralphasen und der Volumenausbildung je nach betrachteter Zone entlang des Aufsättigungsweges ausgeprägt inhomogen sind. Dieser Effekt trat selbst im eindimensionalen Fall auf und ist insbesondere durch die Annahme bedingt, dass die chemischen Prozesse wesentlich schneller ablaufen als die hydraulischen. Diese Annahme wird durch die Laboruntersuchungen des Aufsättigungsprozesses gestützt (sehr schnelle Erwärmung bei Aufsättigung).

Eine realitätsbezogene C:HM-Kopplung muss somit den Stofftransport mit dem Aufsättigungsprozess zusammen erfassen und ist aus diesem Grund mit dem Code MISES3 nicht realisierbar (keine Berücksichtigung instationärer Strömungsprozesse). Prinzipiell möglich erscheint eine C:HM-Kopplung mit dem kommerziellen Code FLAC3D (Berechnung der mechanischen Parameter aus Messwerten und Ergebnissen der chemischen Prozesse statt Ansatz eines Hydratisierungsgrades). Die Spezifik der in diesem Code realisierten C:HM-Kopplung ließ jedoch vor dem Hintergrund der großen Schwankungen in den Materialeigenschaften des SVV keine verlässlichen Berechnungsergebnisse erwarten (Gefahr der Fehlerakkumulation mit möglichem Konvergenzverlust).

Der wissenschaftliche Code GeoSys/RockFlow des ZAG(UFZ) bietet die Möglichkeit, die Porosität und den Kristallisationsdruck unmittelbar aus den Ergebnissen der Simulation von reaktiven Transportprozessen zu berechnen und auf diese Weise eine direktere C:HM-Kopplung zu realisieren. Die ausgeprägten Inhomogenitäten sowie die beträchtlichen Schwankungen der Materialeigenschaften des SVV und damit der verfügbaren Labordaten ließen jedoch, unabhängig von der verwendeten Simulationssoftware, grundsätzlich keine realitätsbezogenen Ergebnisse numerischer Simulationen des Aufsättigungsprozesses erwarten. Somit beschränken sich die im Bericht dargestellten praxisrelevanten Berechnungen auf die Modellierung von idealisierten Experimenten mit eindeutig definierten Bedingungen. Für weiterführende Untersuchungen werden die Analyse experimenteller Verfahren zur Verbesserung der Reproduzierbarkeit der Materialcharakteristika sowie Studien zur Erfassung lokaler Materialdaten angeregt.

Bei der Modellierung der axial gelochten Bohrkerne zeigte sich, dass Axial- und Radialverzerrungen gut abgebildet werden konnten. Für die Ermittlung der Parameter war jedoch ein enormer Aufwand notwendig, da diese individuell an das Verbundsystem Prüfkörper-Bohrlochverfüllung angepasst werden mussten und dafür eine sehr große Anzahl an Berechnungen notwendig war.

Zusätzlich zu den im Projektantrag vorgesehenen Versuchen wurden Experimente zur Messung der Gas- und Lösungsp permeabilität durchgeführt. Dabei wurde die innere Struktur der Prüfkörper per Röntgentomographie analysiert.

Im dritten Teilprojekt *Validierung numerischer Modelle für geochemische Prozesse in geotechnischen Dichtelementen, Kopplung numerischer Modelle für C:HM-Transportprozesse* (ZAG) ist das im Quelltext vorliegende wissenschaftliche Programmsystem GeoSys/RockFlow zur Modellierung von Mehrphasenflüssen in deformierbaren porösen Medien systematisch weiterentwickelt worden. Schwerpunkt waren dabei insbesondere die Erweiterung der Möglichkeiten zur Simulation von Deformationsvorgängen (M) der festen Matrix sowie die Entwicklung effizienter Schnittstellen zu externen Programmmodulen (ChemApp und GEMS) für die Behandlung reaktiver Transportprozesse. Anhand praxisrelevanter Beispiele konnte im Sinne des Vorhabenszieles nachgewiesen werden, dass GeoSys/RockFlow prinzipiell geeignet ist, das gekoppelte C:HM-Verhalten von Bentonit, Salzgestein und SVV-Materialien numerisch zu simulieren.

Der Verallgemeinerungsgrad der entwickelten mathematisch-physikalischen Modelle sowie der gegenwärtige algorithmische Standard des wissenschaftlichen Programmsystems GeoSys/RockFlow gestattet in diesem Zusammenhang die Simulation unterschiedlich motivierter, gekoppelter C:HM-Prozesse in tiefen geologischen Formationen. Das trifft in erster Linie für die projektrelevanten Vorgänge bei der untertägigen Entsorgung chemotoxischer Abfälle zu. Die Modelle und Programmsysteme sind ebenso geeignet, Beiträge zum Langzeitsicherheitsnachweis für die Endlagerung radioaktiver Abfälle zu leisten. Auf entsprechende konkrete Aktivitäten wurde im Bericht teilweise eingegangen. Darüber hinaus sind numerische Analysen von gekoppelten C:HM-Prozessen in tiefen geologischen Formationen möglich, wie sie beispielsweise bei der Kohlendioxidspeicherung oder in der Geothermie auftreten bzw. zu erwarten sind. Die Anpassung an die spezifischen Vorgänge erfolgt dabei im Wesentlichen über die Berücksichtigung entsprechender konstitutiver Beziehungen. Eine Kopplung mit thermischen Prozessen ist problemlos möglich und in GeoSys/RockFlow in anderen Zusammenhängen bereits realisiert.

Grundsätzlich kann als Fazit des Gesamtprojektes festgestellt werden, dass die Umsetzung der mathematisch-physikalischen Modelle für den C:HM-gekoppelten Gesamtprozess in den getesteten kommerziellen Programmen mit substantiellen Einschränkungen verbunden ist. Das im Rahmen dieses Verbundvorhabens für geomechanische Anwendungen häufig eingesetzte Programm FLAC3D gestattet beispielsweise lediglich die Berücksichtigung des Transports einer fluiden Phase in porösen Medien, womit die Betrachtung teilgesättigter Prozesse ausgeschlossen wird. Die in dem ebenfalls weit verbreiteten Code TOUGHREACT mögliche Untersuchung reaktiver Mehrphasenströmungen erlaubt keine programminterne Kopplung zu Deformationsvorgängen. Die Kopplung unterschiedlicher kommerzieller Programme zur Betrachtung der Gesamtprozesse ist aufwändig und ineffizient. Der begrenzte Zugriff auf den algorithmischen Fundus üblicher kommerzieller Programme über vorgegebene Schnittstellen schränkt die Realisierung spezifischer oder auch neuartiger allgemeiner numerischer Modellkomponenten zusätzlich ein. Diese Einschränkungen treffen für das im Quelltext vorliegende wissenschaftliche Programmsystem GeoSys/RockFlow zur Modellierung von Mehrphasenflüssen in deformierbaren porösen Medien sowie dessen Kopplung zu Programmmodulen für die Simulation von Reaktionsprozessen nicht zu.

Unter vereinfachenden Annahmen konnten bei Verwendung unterschiedlicher Software mit experimentellen Daten übereinstimmende numerische Ergebnisse der be-

trachteten gekoppelten C:HM-Prozesse erzielt werden. Damit sind Modelle, Verfahren und numerische Instrumente vorhanden, die in geotechnischen Barrieren ablaufenden Vorgänge im Sinne eines verbesserten Prozessverständnisses qualitativ zu beschreiben. Z. B. konnten mit FLAC3D die von der GRS gemessenen mechanischen Vorgänge die bei der Belastung von mit SVV gefüllten axial gelochten Steinsalzbohrkernen stattfinden qualitativ und quantitativ nachvollzogen werden. Es ist aber zu bemerken, dass die komplexen hydromechanischen und chemischen Vorgänge die bei der Aufsättigung von SVV anzutreffen waren, jedoch nicht im Detail, d. h. quantitativ vollständig mit vorhandenen Daten übereinstimmend, numerisch simuliert werden konnten. Folglich sind mit den vorhandenen Informationen auch keine zuverlässigen Aussagen über das spezifische Verhalten geotechnischer Barrieren unter in-situ-Bedingungen zu erwarten, da dort die Randbedingungen weit weniger bekannt und die lokal benötigten Materialdaten schwieriger zu erfassen sind. Damit bekommt die Problematik der Ergebnisinterpretation numerischer Simulationen gekoppelter C:HM-Prozesse an realen geotechnischen Standorten einen grundsätzlichen Charakter, der über die Ergebnisse des konkreten Vorhabens hinauswirkt. Die Ursachen dafür sind vielfältig und liegen in der subtilen Kopplung komplizierter physikalischer Prozesse der betrachteten Vorgänge. Als wesentlich sind dabei folgende Aspekte anzusehen:

- Die ursprünglich vorgesehene Modellierung des Aufsättigungsprozesses durch eine geeignete Variable (Hydratisierungsgrad) und deren Entwicklung als (möglichst elementare) Funktion messtechnisch erfassbarer chemisch-physikalischer Größen erwies sich als nicht praktikabel, da die betrachteten Prozesse komplexer als gedacht sind.
- Ausgeprägte Inhomogenitäten der untersuchten Materialien, die zudem während der Aufsättigung zeitlich veränderlich und zufallsbedingt sind, erschwerten die lokale experimentelle Charakterisierung des Materialverhaltens.
- Messtechnisch konnten im Wesentlichen nur globale Größen erfasst werden, mit denen die Verifikation numerischer Ergebnisse, die auf Ortsdiskretisierungsverfahren beruhen (z. B. Finite Element Methode) nur bedingt möglich ist.
- Eine den markanten Materialinhomogenitäten adäquate Identifikation von Materialparametern war weder experimentell noch numerisch im Rahmen des beantragten Vorhabens realisierbar.

Zusammenfassend wird hervorgehoben, dass die Grundlagen für weitere Techniken zur Verfüllung von Hohlräumen mit SVV wie z. B. das Anmischen von SVV mit NaCl-Lösung erarbeitet worden sind und sich die bereits in anderen Vorhaben aufgezeigten,

günstigen Verschlusseigenschaften von SVV in diesem Projekt insgesamt bestätigt haben. Zudem konnten weitere positive Aspekte des Materialverhaltens von SVV festgestellt werden. So wurde z. B. an geschädigten Prüfkörpern aus angemischtem SVV ein signifikanter Verheilungseffekt beobachtet. Für die Simulation der bei der Aufsättigung von SVV ablaufenden gekoppelten Prozesse waren die im Projekt verwendeten und entwickelten Annahmen und Modelle nicht ausreichend. Hier besteht weiterer Forschungsbedarf.

Ziel zukünftiger Forschungsvorhaben für SVV sollte somit die Fortentwicklung der Technologie und des Instrumentariums für die sicherheitsbezogene Nachweisführung sein. Grundsätzlich deuten sich dabei für SVV drei mögliche Forschungsrichtungen an:

1. *Materialverhalten von wasserfrei eingebrachtem SVV:* Untersuchungsziele sind hier die Vorhersage des Materialverhaltens im gestörten (Lösungszutritt) und ungestörten Betrieb (kein Lösungszutritt). Für die Prognose des ungestörten Betriebes muss ein mechanisches Stoffmodell experimentell ermittelt werden und die langfristige Entwicklung der Materialeigenschaften unter dem Einwirken des Gebirges prognostiziert werden. Im gestörten Betrieb muss durch experimentelle und numerische Untersuchungen festgestellt werden, ob und unter welchen Bedingungen der SVV in der Lage ist, die zutretenden Lösungen zurückzuhalten. Hierfür sind weitere Untersuchungen notwendig, um eine Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung aufstellen zu können.
2. *Materialverhalten von SVV, das vor der Einbringung mit Lösung angemischt wurde:* In diesem Projekt sind durch Anmischen etliche Prüfkörper hergestellt worden. Angesichts der Schwierigkeiten, die dabei technologisch beherrscht werden mussten, erscheint eine Technologieerprobung in größerem Maßstab sinnvoll, z. B. mit einer Spritzbetonmaschine. Untersuchungen des angemischten SVV bezüglich seiner Spitzenfestigkeit sind bereits in diesem Projekt erfolgt. Erste Untersuchungen zum Kriechverhalten in diesem Projekt haben gezeigt, dass bei angemischtem SVV die Kompaktion ein dominanter Prozess ist, der für längerfristige Vorhersagen experimentell genauer erfasst werden muss. Zusätzlich sollten das in diesem Projekt nur unzureichend erfasste Kriechverhalten und die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung genauer quantifiziert werden. Wesentlich für die Charakterisierung der Eigenschaften des angemischten SVV ist ebenfalls die Reaktion auf anstehende Lösungen verschiedener Art, die experimentell und numerisch untersucht werden sollte.

3. *Aufsättigung von SVV*: Die ursprünglich vorgesehene Methode der Verfüllung von SVV durch trockene Einbringung und anschließende künstliche Aufsättigung wird weiter verfolgt. Dabei ist zu untersuchen:

- Experimentell: Analyse und Erfassung der grundlegenden Phänomene, insbesondere während des Aufsättigungsprozesses von SVV; damit einhergehend die Entwicklung spezifischer experimenteller und numerischer Verfahren zur Identifikation der erforderlichen Materialparameter. Erfahrungen aus diesem Vorhaben sollen dabei einfließen:
  - Als besonders hinderlich erwies sich der Umstand, dass mit lediglich einem Drucksensor punktuell Messwerte erfasst wurden, die innerhalb des Prüfkörpers außerordentlich starke Schwankungen aufwiesen.
  - Wesentlich für zukünftige Versuche wird es auch sein, die Herstellung von Prüfkörpern so zu modifizieren, dass diese reproduzierbarere Eigenschaften aufweisen.
- Theoretisch: Die mathematische Modellierung wesentlicher konstitutiver Effekte sowie die Auswahl bzw. gegebenenfalls eine Neuentwicklung von Materialgleichungen.

Bezüglich der Modellbildung und Simulation können dabei beispielsweise wissenschaftliche Annahmen und Verfahren als Basis dienen, die sich in anderen Anwendungsfällen bereits bewährt haben. Relevante Ansätze sind beispielsweise

- die Nutzung stochastischer Verfahren im Sinne einer Unsicherheitsanalyse,
- die makroskopische Beschreibung von auf der Mikroebene inhomogenen Feldern mit Homogenisierungsverfahren,
- die Simulation von Aushärtungsprozessen auf der Basis kontinuumsmechanischer Ansätze mit inneren Variablen sowie
- die Verwendung inverser mathematischer Methoden zur Kalibrierung der Materialmodelle (Parameteridentifikation).

Bezüglich des Quellverhaltens von Bentonit sehen wir die folgenden Entwicklungsmöglichkeiten.

- Entwicklung eines Modells zur Beschreibung des ionenspezifischen Einflusses auf den Quelldruck und auf andere mechanische Eigenschaften des Bentonits;

- Experimentelle Ermittlung und modelltheoretische Berücksichtigung von Inhomogenitäten und der Makrostruktur in Bentonit.

Diese Aufzählung möglicher weiterführender Studien ist weder erschöpfend noch endgültig. Sie ist als optionale Anregung für eine verbesserte anwendungsrelevante Simulation des gekoppelten C:HM-Verhaltens von Verschlussbauwerken für chemotoxische Abfälle zu verstehen und sollte in diesem Sinne Gegenstand weiterer Diskussionen zu einer Fortführung der wissenschaftlichen Arbeiten sein.



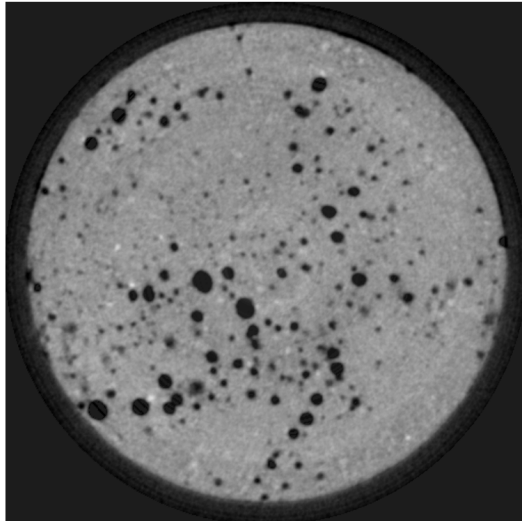
## **11        Anhang**

### **11.1        Chemische Analysen der Triaxialpermeationsmessungen**

Wie in Kap. 3.7.1 dargelegt, weisen die durch Anmischen hergestellten Prüfkörper eine so geringe Permeabilität auf, dass das Material als dicht gegenüber NaCl-Lösung bezeichnet werden kann. Aus diesem Grund stehen auch aus den Versuchen SVV227 und SVV235 keine Lösungen zur chemischen Analyse zur Verfügung, die den Prüfkörper durchströmt haben.

Bei der Herstellung der Prüfkörper kann es jedoch auch passieren, dass ein ausgehärteter Prüfkörper infolge einer nicht optimalen Durchmischung von Lösung und SVV Defekte im Gefüge aufweist. Dieser Fall liegt bei Prüfkörper SVV228 vor. Da die Gefügedefekte nur oberflächlich vorzuliegen schienen, wurde der Prüfkörper von den Abmessungen  $d/h = 90 \times 180 \text{ mm}$  auf  $d/h = 60 \times 150 \text{ mm}$  abgedreht, dadurch augenscheinlich von den Defekten befreit, anschließend röntgentomografisch eingescannt und in das Triaxialpermeameter eingebaut.

Nach der Auswertung der röntgentomografischen Aufnahmen zeigte sich jedoch, dass die Gefügedefekte nicht nur im Außenbereich des Prüfkörpers vorhanden waren, sondern dass der Prüfkörper auch in seinem Inneren eine große Anzahl von Porenräumen enthält und somit eine hohe Porosität besitzt (Abb. 11.1). Die gemessene Stickstoff-Permeabilität beträgt  $\approx 10^{-15} \text{ m}^2$  und ist damit so groß, dass daraus geschlossen werden kann, dass die einzelnen Poren zumindest teilweise miteinander vernetzt sind. Da beim Prüfkörper SVV228 bedingt durch den großen Porenraum ein über längere Zeit durchlässiger Prüfkörper vorlag, wurde, auch wenn Gefügedefekte herstellungsbedingte entstanden sind, eine Durchströmung mit NaCl-Lösung vorgenommen. Hierbei zeigte sich, dass die Wegsamkeiten so groß waren, dass eine Schließung der Wegsamkeiten wie bei dem untersuchten Scherbruch am Prüfkörper SVV235 nicht erfolgte.



**Abb. 11.1** Horizontalschnitt bei  $l = 107 \text{ mm}$  durch den unbeprobten Prüfkörper SVV228 mit deutlich erkennbaren großen Porenräumen, die auf die schlechte Durchmischung zurückzuführen sind

Die durch den Prüfkörper geströmte Lösung ist aufgefangen und chemisch analysiert worden. Hierbei wurden der gesamte Salzgehalt der Lösung durch Trocknung bestimmt und auch der Anteil an  $\text{MgSO}_4$  in der Lösung. Es besteht die Möglichkeit, dass das Wasser bei der Trocknung nicht vollständig verdunstet ist und noch Reste an chemisch gebundenem Kristallwasser vorliegen könnten. Daher können die für den NaCl-Gehalt angegebenen Werte von den tatsächlichen Werten etwas nach oben abweichen. Dennoch ist deutlich erkennbar, dass bei der Durchströmung  $\text{MgSO}_4$  aus dem Prüfkörper gelöst wurde und zwar in vergleichsweise großen Mengen (Tab. 11.1). Durchschnittlich werden im Versuchszeitraum etwa  $100 \text{ g/l}$   $\text{MgSO}_4$  gelöst, während  $80 \text{ g/l}$  NaCl aus der Lösung ausfallen. Daraus folgt eine  $\text{MgSO}_4$ -Sättigung von etwa 40 – 50 % (Tab. 11.1

**Ergebnisse der chemischen Analysen der durch den Prüfkörper SVV 228 geströmten Lösungen**

| Probe | Dichte [ $\text{g/cm}^3$ ] | Salzgehalt [ $\text{g/l}$ ] | $\text{MgSO}_4$ [ $\text{g/l}$ ] | NaCl [ $\text{g/l}$ ] |
|-------|----------------------------|-----------------------------|----------------------------------|-----------------------|
| 1     | 1,259                      | 381,6                       | 107                              | 274,6                 |
| 2     | 1,264                      | 390,5                       | 108,7                            | 281,8                 |
| 3     | 1,245                      | 374,3                       | 87,9                             | 286,4                 |

Tab. 11.2).

**Tab. 11.1** Ergebnisse der chemischen Analysen der durch den Prüfkörper SVV 228 geströmten Lösungen

| Probe | Dichte [g/cm <sup>3</sup> ] | Salzgehalt [g/l] | MgSO <sub>4</sub> [g/l] | NaCl [g/l] |
|-------|-----------------------------|------------------|-------------------------|------------|
| 1     | 1,259                       | 381,6            | 107                     | 274,6      |
| 2     | 1,264                       | 390,5            | 108,7                   | 281,8      |
| 3     | 1,245                       | 374,3            | 87,9                    | 286,4      |

**Tab. 11.2** Chemische Bestandteile der Gleichgewichtslösung

|                      | Dichte [g/cm <sup>3</sup> ] | Salzgehalt [g/l] | MgSO <sub>4</sub> [g/l] | NaCl [g/l] |
|----------------------|-----------------------------|------------------|-------------------------|------------|
| Gleichgewichtslösung | 1,28                        | 379              | 230                     | 149        |

Anmerkung: Da die entsprechenden Daten in der Literatur nicht vorhanden waren, wurden sie durch Vermessen einer eigens hergestellten Gleichgewichtslösung gewonnen

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass der Versuch SVV228 aufgrund der nicht optimalen Herstellung des Prüfkörpers keine für SVV repräsentativen Ergebnisse liefert. Dieser Prüfkörper zeigt jedoch, dass der Herstellungsprozess auch in situ von zentraler Bedeutung sein wird, da es gilt für das Verschlussbauwerk einen homogenen Baustoff herzustellen. Falls das Verschlussbauwerk ein vernetztes Porensystem wie der Prüfkörper SVV228 aufweisen sollte, besteht die Gefahr, dass analog zum Versuch SVV228 eine Durchströmung und ein Abtransport von MgSO<sub>4</sub> erfolgen könnte und damit ein hydraulisches Versagen des Verschlussbauwerks durch chemisch bedingte Ausbildung sekundärer Wegsamkeiten nicht auszuschließen wäre. Festzuhalten ist an dieser Stelle jedoch, dass aufgrund der ausgeprägten mechanischen Riss-schließung der SVV bei korrekter Herstellung nahezu impermeabel sein sollte und dass im Falle einer nicht optimalen Herstellung die entstandenen Porenräume im Lauf der Zeit ebenfalls geschlossen werden sollten. Bei fehlerhafter Herstellung bestünde nur in der Anfangszeit die Gefahr eines Lösungsdurchbruchs.

## 11.2 Ergänzungen zum mechanischen Modell für SVV

### 11.2.1 Parameter zur Beschreibung des kurzfristigen Materialverhaltens (Stoffmodelle Hooke und LUBBY1)

Das Stoffmodell von Hooke

$$\begin{aligned}\varepsilon_x &= \frac{1}{E} \cdot (\sigma_x - \nu(\sigma_y + \sigma_z)) \\ \varepsilon_y &= \frac{1}{E} \cdot (\sigma_y - \nu(\sigma_z + \sigma_x)) \\ \varepsilon_z &= \frac{1}{E} \cdot (\sigma_z - \nu(\sigma_x + \sigma_y))\end{aligned}\tag{11.1}$$

mit

|   |  |
|---|--|
| $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$ | Verformung in x, y, und z – Richtung [1] |
| $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$                | Spannung in x, y, und z – Richtung [MPa] |
| $E$   | Verformungsmodul [MPa]                   |
| $\nu$   | Poissonzahl (Querdehnungszahl) [1]       |

beschreibt das Materialverhalten eines ideal linear-elastischen Werkstoffes mit den Materialparametern  $E_\nu$  und  $\nu$ .

Das Stoffmodell LUBBY1

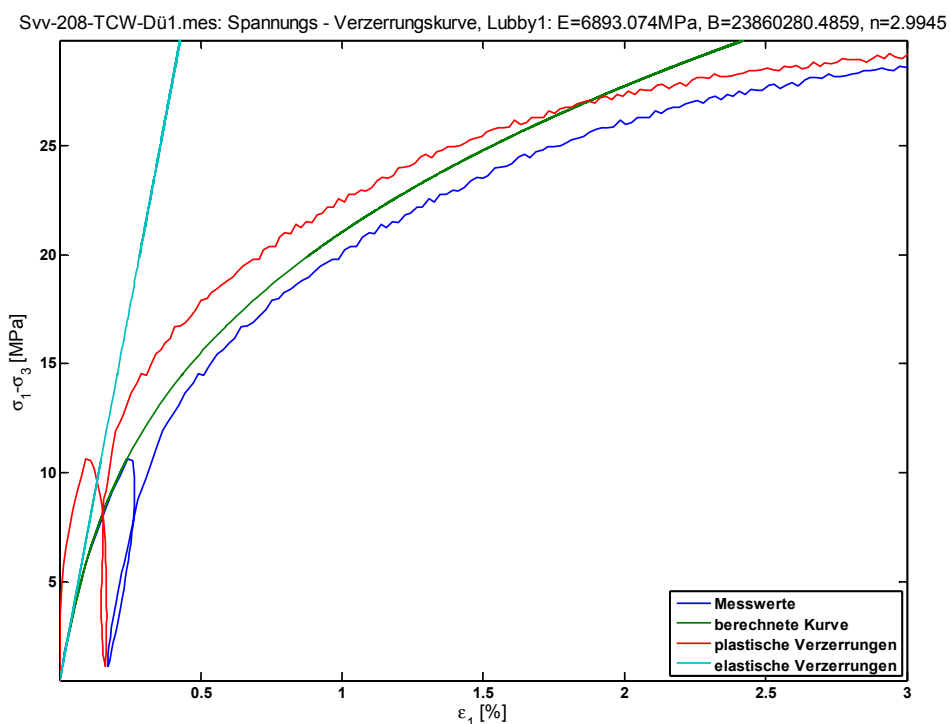
$$\varepsilon_x = \frac{\sigma_v}{E} + B \cdot \left( \frac{\sigma_v}{E} \right)^n\tag{11.2}$$

mit

|                 |                                |
|-----------------|--------------------------------|
| $\varepsilon_x$ | Verformung in x – Richtung [1] |
| $\sigma_v$      | Vergleichsspannung [MPa]       |
| $E$             | Elastizitätsmodul [MPa]        |
| $B, n$          | Materialparameter [1]          |

erweitert das Stoffmodell von Hooke um einen plastischen Deformationsanteil, der dem elastischen Anteil additiv überlagert wird. Zusätzlich zu den Materialparametern des Stoffmodells Hooke werden noch die Parameter  $B$  und  $n$  benötigt.

Zur Ermittlung der Materialparameter sind die gemessenen Spannungs-Verzerrungskurven der triaxialen Kompressionsversuche verwendet worden (Abb. 11.2). Zunächst wurden dazu von den gemessenen Verzerrungen die elastischen Anteile subtrahiert. Der dafür benötigte  $E_V$ -Modul wurde durch lineare Näherung aus der Erstbelastung gewonnen (Anfangs-Verformungsmodul). Als Erstbelastung ist dabei der Bereich von  $\varepsilon_1 = 0,01$  bis  $0,05$  % Verzerrung gewählt worden, da für  $\varepsilon_1 > 0,01$  % davon ausgegangen werden kann, dass die Druckplattenform auf dem Prüfkörper aufliegen und für  $\varepsilon_1 < 0,05$  % davon ausgegangen werden kann, dass nur minimale plastische Verzerrungen vorliegen.



**Abb. 11.2** Am Prüfkörper SVV-208 gemessene Spannungsverzerrungskurve mit elastischen und plastischen Anteilen sowie der berechneten Verzerrungskurve des Stoffmodells LUBBY1

Die Materialparameter  $B$  und  $n$  werden aus dem plastischen Deformationsanteil bestimmt. Hierzu wurden die gemessenen Spannungen und Verzerrungen, wie bei Potenzfunktionen üblich, logarithmisch linear angenähert. Verwendet wurden hierbei ana-

log wie bei der Bestimmung des Anfangs-Verformungsmoduls, Messdaten für eine Verzerrung von  $\varepsilon_1 = 0,01 \%$ , bis zu einer Verzerrung von  $\varepsilon_1 = 0,25 \%$ , da nach Erreichen dieser Verzerrung der Zyklus zur Ermittlung des Ent- und Wiederbelastungsmoduls gefahren wurde.

Aus Triaxialversuchen kann die Querdehnungszahl nur bestimmt werden, wenn die radialen Verzerrungen mitgemessen werden. Diese Messung ist zwar möglich, z. B. mit Hilfe von Dehnungsmessstreifen, ist jedoch auch sehr aufwändig und fehleranfällig. Da die Querdehnungszahlen bereits bei den Ultraschallmessungen, die im Rahmen der Prüfkörpervorbereitung vorgenommen worden sind, bestimmt worden sind, wurde auf die nochmalige Messung der Querdehnung mit Dehnungsmessstreifen verzichtet.

Die aus den triaxialen Festigkeitsversuchen für die Stoffmodelle Hooke und LUBBY1 abgeleiteten Materialparameter sind in Tab. 11.3 aufgelistet.

**Tab. 11.3** Übersicht über die ermittelten Stoffmodellparameter für die Stoffmodelle Hooke und LUBBY1

| Versuch | E [MPa] | $\nu$ [1] | B          | n     |
|---------|---------|-----------|------------|-------|
| 202     | 5779,5  | 0,308     | 194635,1   | 2,370 |
| 206     | 7324,4  | 0,341     | 800943,7   | 2,595 |
| 208     | 6893,1  | 0,283     | 23860280,0 | 2,995 |
| 209     | 7921,6  | 0,321     | 37383972,0 | 3,137 |
| 210     | 8117,1  | 0,325     | 157464,9   | 2,366 |
| 211     | 8670,4  | 0,312     | 118202,6   | 2,275 |
| 212     | 7879,8  | 0,321     | 13875309,0 | 2,919 |
| 213     | 8211,1  | 0,300     | 17821,3    | 1,979 |
| 214     | 7127,2  | 0,310     | 439543,8   | 2,507 |
| 215     | 6908,8  | 0,292     | 1598410,1  | 2,660 |
| 216     | 7286,6  | 0,286     | 16275,0    | 1,984 |
| 265     | 7671,0  | -         | 2765196,3  | 2,777 |
| 268     | 6716,0  | -         | 12295199,0 | 3,047 |
| 269     | 8404,8  | -         | 599258,9   | 2,458 |
| 270     | 7137,8  | -         | 3168792,1  | 2,787 |
| 271     | 7360,6  | -         | 1624203,3  | 2,642 |

Aus Tab. 11.3 ergeben sich die folgenden Rechenkennwerte (Mittelwerte mit Streubreich):

- $E_V$ -Modul  $E_V = 7463 \pm 710 \text{ MPa}$
- Poissonzahl  $\nu = 0,309 \pm 0,0169$

- Parameter  $B$   $B = 983586 \cdot 10^{\pm 1}$
- Parameter  $n$   $n = 2,594 \pm 0,338$

Die angegebenen Abweichungen sind die Standardabweichungen bzw. im Falle des Parameters  $B$  die logarithmische Standardabweichung.

### **11.2.2 Parameter zur Beschreibung des langfristigen Materialverhaltens (Stoffmodell LUBBY2)**

Bei der Vorstellung der Messdaten in Kap. 3.6 wurde bereits gezeigt, dass den Kriechverzerrungen so starke Kompaktionsverzerrungen überlagert sind, dass eine der grundlegenden Voraussetzungen des Stoffmodells LUBBY2, nämlich die Volumenkonstante Kriechdeformation nicht erfüllt ist und die Kriechparameter für das Stoffmodell LUBBY2 daher nicht entsprechend Kap. 3.6.2 ermittelt werden können. Grundsätzlich bestehen zwei Möglichkeiten:

- Aufteilung der gemessenen Deformationen in einen Kompaktionsanteil und einen deviatorischen Deformationsanteil und getrennte Modellierung (Kompaktionsmodell und Stoffmodell LUBBY2),
- Gemeinsame Modellierung von Kompaktionsverformungen und deviatorischen Verformungen ohne Aufteilung in einem Stoffmodell (Stoffmodell HOU/LUX bzw. Korthaus/Hein).

Hier wird die zweite Möglichkeit gewählt. Für die Simulation der Bohrlochlagerung hat sich im Nachhinein das Stoffmodell Korthaus/Hein wegen der Dominanz des Kompaktionsverhaltens als geeigneter erwiesen, die Parameterableitung erfolgt in Kap. 4.1.2. Im Folgenden wird die Ermittlung der Stoffmodellparameter für das Stoffmodell LUBBY2 dokumentiert, da die Möglichkeit besteht, dass dieses Stoffmodell für andere Berechnungen verwendet werden kann.

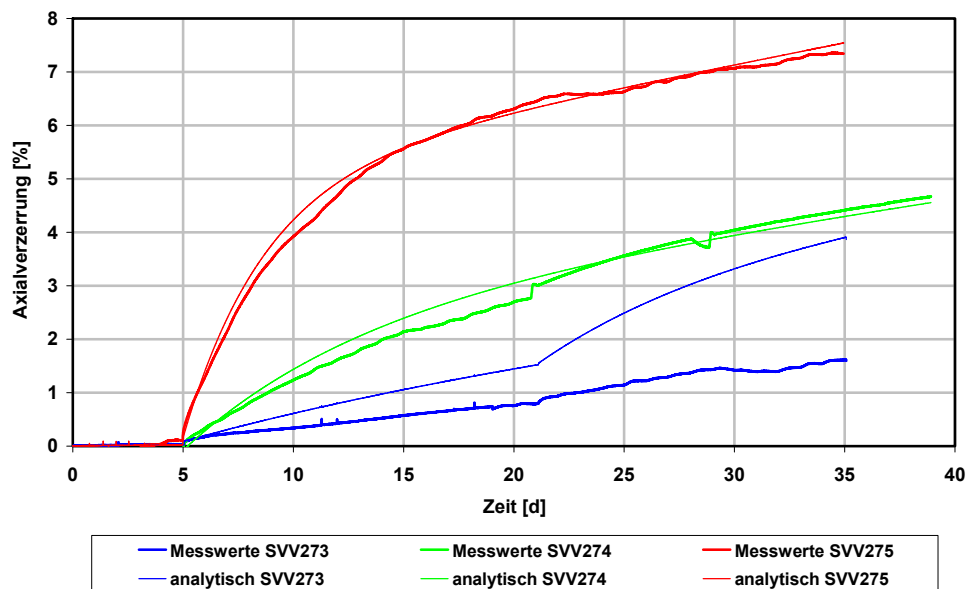
Bei der Anpassung der Parameter hat sich gezeigt, dass der Versuch SVV273 geringere Verzerrungen aufweist als die anderen beiden Versuche. Die Abbildung aller drei Versuche mit einem einzigen Parametersatz führt somit zu großen Abweichungen zwischen Berechnungs- und Messwerten. Aus diesem Grund ist beschlossen worden die Parameter vorrangig an die Versuche SVV274 und SVV275 anzupassen, bedingt

durch die die größeren Verzerrungen ein konservativer Ansatz, aus dem die folgenden Parameterwerte resultieren:

**Tab. 11.4** LUBBY2 Parameter für angemischten SVV

| Parameter | Wert    | Einheit |
|-----------|---------|---------|
| $\eta_m$  | 20.000  | MPa d   |
| $m$       | -0,05   | 1/MPa   |
| $\eta_k$  | 300.000 | MPa     |
| $k_2$     | -0,6    | 1/MPa   |
| $G_k$     | 1.500   | MPa     |
| $k_1$     | -0,2    | 1/MPa   |

Mit den in Tab. 11.4 empirisch ermittelten Parametern ergibt sich bei den Versuchen SVV274 und SVV275 eine sehr gute Übereinstimmung zwischen analytisch berechneten Axialverformungen und den gemessenen Axialverformungen (Abb. 11.3). Somit können die in den Versuchen SVV274 und SVV275 gemessenen Axialverzerrungen mit dem Stoffmodell LUBBY2 abgebildet werden.



**Abb. 11.3** Messkurven der Prüfkörper SVV273 – SVV275 und die Ergebnisse der analytischen Berechnungen



### 11.2.3 Parameter zur Beschreibung der Bruchfestigkeit von SVV (Stoffmodell HOU/LUX)

Im Stoffmodell HOU/LUX wird die Bruchfestigkeitsgrenze (Spitzenfestigkeit) von Salzgestein über eine Exponentialfunktion beschrieben ([HOU 02]):

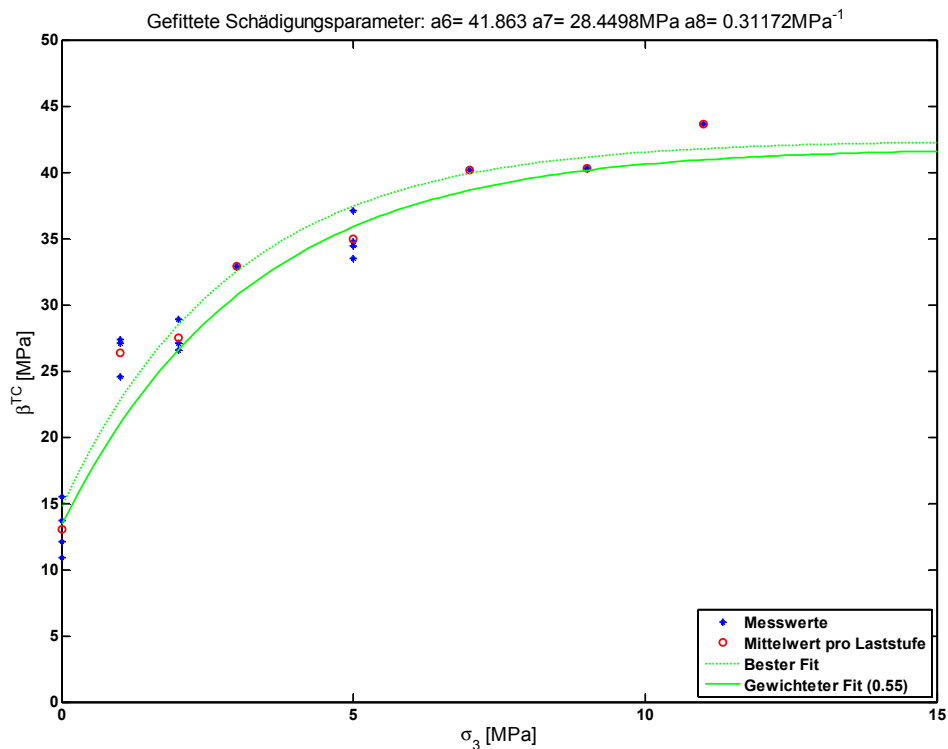
$$\beta^{TC}(\sigma_3) = a_6 - a_7 \cdot e^{-a_8 \cdot \sigma_3} \quad (11.3)$$

mit

$\beta^{TC}(\sigma_3)$  = Triaxiale Spitzenfestigkeit [MPa] in Abhängigkeit der Minimalspannung  $\sigma_3$  [MPa]

$a_6, a_7, a_8$  = Materialparameter für die Schädigung [MPa], [MPa], [1/MPa]

Mit dieser Funktion werden die laborativ in Triaxialversuchen gemessenen Spitzenfestigkeiten in Abhängigkeit der Minimalspannung  $\sigma_2 = \sigma_3 = \min \sigma$  beschrieben. Abb. 11.4 zeigt die Messwerte. Zur Bestimmung der in Gleichung (11.3) enthaltenen Materialparameter wird so vorgegangen, dass grobe Startwerte für die Parameter  $a_6$ ,  $a_7$  und  $a_8$  angenommen werden und anschließend mit Hilfe der Matlab-Funktion „fminsearch“ durch einen Variationsprozess die Parameter ermittelt werden, für die eine möglichst gute Übereinstimmung zwischen Messwerten und der Näherungsfunktion in Form eines mathematischen Minimums liefern. Als Minimum wurde dabei die quadratische Abweichung der Messwerte von der Näherungsfunktion gewählt, wobei für jede Laststufe jeweils nur der Mittelwert herangezogen wurde, um eine indirekte Gewichtung in Abhängigkeit von der Anzahl der jeweiligen Messwerte zu vermeiden (Abb. 11.4).



**Abb. 11.4** Gemessene Spitzenfestigkeiten für SVV in Abhängigkeit von der Minimalspannung und Näherungsfunktion

Mit dieser Methode wurde bei den Zahlenwerten

$$a_6 = 42,423 \text{ MPa}$$

$$a_7 = 27,627 \text{ MPa} \text{ und}$$

$$a_8 = 0,3423 \frac{1}{\text{MPa}}$$

die mathematisch beste Übereinstimmung erzielt. Für die Berechnungen wird eine konservativere Abschätzung gewählt, indem bei der Suche des Minimums die Abweichungen über die Näherungsfunktion mit einem Faktor von 0,55 gewichtet und entsprechend abgewertet werden. Damit ergeben sich für eine mögliche konservative Approximation der Messwerte die folgenden Materialparameter:

$$a_6 = 41,863 \text{ MPa}$$

$$a_7 = 28,50 \text{ MPa} \text{ und}$$

$$a_8 = 0,3117 \frac{1}{\text{MPa}}$$

## Literaturverzeichnis

- [BEN 02] Bennethum L., Cushman J. (2002): Multicomponent, multiphase thermodynamics of swelling porous media with electroquasistatics II: Constitutive theory, Transport Porous Med. (47), 337-362.
- [BEN 04] Bennethum L., Weinstein T. (2004): Three pressures in porous media. Transport Porous Med. (54), 1-34.
- [BÖR 85] Börgesson L. (1985): Water flow and swelling pressure in non-saturated bentonite-based clay barriers, Engineering Geology (314), 229-237.
- [CHA 13] Chapman D. (1913): A contribution to the theory of electrocapillarity, Philosophical Magazine (25), 475.
- [COR 39] Correns C. W., und Steinborn W., D. E. (1939): Experimente zur Messung und Erklärung der sogenannten Kristallisationskraft, Universität Rostock, Mineralogisch-petrographisches Institut.
- [DER 41] Derjaguin B.; Landau L. (1941): Theory of the stability of strongly charged lyophobic soils and of the adhesion of strongly charged particles in solutions of electrolytes, Acta Physiochem. USSR (14), 633-662.
- [EBZ 06] Eberth S., Lux K.-H., Düsterloh U., Hou Z., (2006): Weiterentwicklung eines Prognosemodells zum Barriereintegritäts- und Langzeitsicherheitsnachweis für Untertagedeponien mit besonderer Berücksichtigung von Gefügeschädigung und Schädigungsverheilung auf der Grundlage der Continuum-Damage-Theorie, BMBF- Forschungsvorhaben 02 C 0720, Abschlussbericht, Institut für Aufbereitung, Deponietechnik und Geomechanik, Clausthal-Zellerfeld.
- [ERI 94] Eriksson G., Sippola H., Sundman B. (1994): A Proposal for a General Thermodynamic Software Interface. In: A. Jokilaakso (ed.), Proceedings of the Colloquium on Process Simulation, pages 67-103, Espoo. Helsinki University of Technology, Report TKK-V-B99.

- [ERI 95] Eriksson G., Spencer P.J., Sippola H. (1995): A General Thermodynamic Software Interface. In: A. Jokilaakso (ed.), Proceedings of the 2nd Colloquium on Process Simulation, page 113, Espoo. Helsinki University of Technology, Report TKK-V-B104.
  
- [ERI 97] Eriksson G., Hack K., Petersen S. (1997): ChemApp – A programmable thermodynamic calculation interface. In: J. Hirsch (ed.), Werkstoffwoche '96, Symposium 8: Simulation, Modellierung, Informationssysteme, p.47, ISBN 3-88355-236-4, published by: DGM Informationsgesellschaft mbH, Hamburger Allee 26, D-60486 Frankfurt, Germany.
  
- [FEI 96] Fein E., Müller-Lyda I., Storck R. (1996): Ableitung einer Permeabilitäts-Porositätsbeziehung für Salzgis und Dammbaumaterialien, GRS-132, ISBN 3-923875-83-5; Köln/Deutschland.
  
- [GOU 10] Gouy G. (1910): Sur la constitution de la charge electrique de la surface d'un electrolyte, Journal de Physique (9), 457-468.
  
- [HEI 91] Hein H.-J. (1991): Ein Stoffgesetz zur Beschreibung des thermomechanischen Verhaltens von Salzgranulat, Dissertation an der RWTH Aachen.
  
- [HER 02] Herbert H. J.; Moog H. C. (2002): Untersuchungen zur Quellung von Bentoniten in hochsalinaren Lösungen, Abschlussbericht des Vorhabens 02 E 8986 5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-179, ISBN 3-931995-47-X.
  
- [HER 07] Herbert H.-J. (2007): Self sealing backfill (SVV) – A salt based material for constructing seals in salt mines. In: The mechanical behaviour of salt, S. 259, ISBN 13: 978-0-415-44398-2, Taylor & Francis Group, London.
  
- [HES 00] Hesser J. (2000): Zum Einfluss unterschiedlicher Spritzbetonqualitäten auf das Tragverhalten tiefliegender Gesteinsstrecken. Schriftenreihe Professur für Deponietechnik und Geomechanik Institut für Aufbereitung, Deponietechnik und Geomechanik Technische Universität Clausthal, Heft Nr. 10, S. 8ff, ISBN 3-89720-369-3, Papierflieger, Clausthal-Zellerfeld.

- [HES 00] Hesser J. (2000): Zum Einfluss unterschiedlicher Spritzbetonqualitäten auf das Tragverhalten tiefliegender Gesteinsstrecken – Laborative Untersuchungen und numerische Analysen. Dissertation an der TU Clausthal.
- [HOU 00] Hou Z. (2000): Numerical Implementation of the Material Model Hou/Lux for Rock Salt based on Continuum Damage Mechanics and its Numerical Simulations, Proceedings of EUROCK 2000 Symposium, Aachen.
- [HOU 02] Hou Z. (2002): Geomechanische Planungskonzepte für untertägige Tragwerke mit besonderer Berücksichtigung von Gefügeschädigung, Verheilung und hydro-mechanischer Kopplung-Schriftenreihe der Professur für Deponietechnik und Geomechanik, Papierflieger, Clausthal-Zellerfeld 2002.
- [HOU 03a] Hou Z. (2003): Mechanical behaviour of salt in the excavation disturbed zone around underground facilities, Int. J. of Rock Mechanics and Mining Sciences (40,5), 725-738.
- [HOU 03b] Hou Z., Lux K.-H., Düsterloh, U. (2003): Mechanical degradation and self-healing of excavation damaged zones (EDZ) around an 85-year-old open & bulkhead drift in Asse mine. Poster in the European Commission CLUSTER Conference on the Impact of EDZ on the Performance of Radioactive Waste Geological Repositories. 3.-5. November 2003, Luxembourg.
- [HOU 03c] Hou, Z., Lux, K.-H. (2003): Mechanical degradation and self-healing of the excavation damaged zone around a drift dam in rock salt. Proceedings of the European Commission CLUSTER Conference on the Impact of EDZ on the Performance of Radioactive Waste Geological Repositories. 3-5 November 2003, Luxembourg.
- [HOU 04] Hou Z. (2004): Gekoppelte Modellierung des C:HM-Verhaltens von selbstverheilendem Salzversatz, BMBF-Verbundprojekt, Teilprojekt TU-Clausthal – Vorhabensbeschreibung, Clausthal-Zellerfeld.
- [HOU 97] Hou Z. (1997): Untersuchungen zum Nachweis der Standsicherheit für Untertagedeponien im Salzgebirge. – Schriftenreihe der Professur für Deponietechnik und Geomechanik, Papierflieger, Clausthal-Zellerfeld 2002.

- [HOU 98] Hou Z., Lux K. – H. (1998): Ein neues Stoffmodell für duktile Salzgesteine mit Einbeziehung von Gefügeschädigung und tertiärem Kriechen auf der Grundlage der Continuum-Damage-Mechanik, *Geotechnik* 21(3), pp. 259-263.
- [HUN 94] Hunsche U., Schulze O. (1994): “Das Kriechverhalten von Steinsalz”, *Kali und Steinsalz* (11), 238.
- [HUY 99] Huyghe J., Janssen J. (1999): Thermo-chemo-electro-mechanical formulation of saturated charged porous solids, *Transport Porous Med.* (34), 129-141.
- [IAT 03] Iatridis J., Laible J., Krag M. (2003): Influence of fixed charge density magnitude and distribution on the intervertebral disc: Applications of a poroelastic and chemical electric PEACE model, *Journal of Biomechanical Engineering* (125), 12-24.
- [IGS 98] IGS (1998): Recommended descriptions of geosynthetics functions, geosynthetics terminology, mathematical and graphical symbols. Report, International Geosynthetics Society.
- [ITA 05] Itasca Consulting Group, Inc. USA (2005): *FLAC3D, Fast Lagrangian Analysis of Continua in 3 Dimensions. Second Edition (FLAC3D Version 3.0)* September 2005, Itasca Consulting Group, Inc., Minneapolis, Minnesota 55401, USA.
- [ITA 08] Itasca Consulting Group, Inc. USA, Homepage (2008): [http://www.itascacg.com/flac3d\\_pubs.html](http://www.itascacg.com/flac3d_pubs.html).
- [KAT 01] Katti D., Shanmugasundaram V. (2001): Influence of swelling on the microstructure of expansive clays, *Can. Geotech. J.* (38,1), 175-182.
- [KOL 04] Kolditz O., Bauer S. (2004): A process-orientated approach to compute multi-field problems in porous media. *Int. Journal of Hydroinformatics* (6), 225-244.
- [KOL 09] Kolditz O., Shao H. (Eds.) (2009): *GeoSys Open THMC Developer Benchmarks Book*. Internet document, [www.GeoSys.ufz.de](http://www.GeoSys.ufz.de) (certificate necessary).
- [KOR 98] Korthaus E. (1998): Experiments on crushed Salt Consolidation with true triaxial Testing Device as a Contribution to an EC-Benchmark Exercise (FZKA 6181). Forschungszentrum Karlsruhe, Oktober 1998, 44630.

- [KOS 09] Kosakowski. G., Blum. Ph., Kulik D., Pfingsten. W., Shao, H., Singh. A. (2009): Evolution of a generic clay/cement interface: First reactive transport calculations utilizing a Gibbs energy minimization based approach for geochemical calculations, Journal of Environmental Science and Sustainable Society, submitted.
- [LOW 79] Low P. F. (1979): Nature and properties of water in montmorillonite-water systems, Soil Sci. Soc. Am. J. (43), 651-658.
- [LOW 87] Low P. F. (1987): Structural component of the swelling pressure of clays, Langmuir (3), 18-25.
- [LOW 92] Low P. F. (1992): Interparticle forces in clay suspensions: Flocculation, viscous flow and swelling. In: Proc. 1989 Clay Min. Soc. Workshop on Rheology of Clay/Water Systems.
- [LUX 84] Lux K.-H. (1984): Gebirgsmechanischer Entwurf und Felderfahrungen im Salzka-  
vernienbau: Ein Beitrag zur Entwicklung von Prognosemodellen für den Hohl-  
raumbau im duktilen Salzgebirge, Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart.
- [LUX 06] Lux K.-H., Eberth S., Düsterloh U. (2006): Weiterentwicklung eines Prognosemo-  
dells zum Barrierenintegritäts- und Langzeitsicherheitsnachweis für Untertagede-  
ponien mit Berücksichtigung von Gefügeschädigung und Schädigungsverheilung  
auf der Grundlage der Continuum-Damage-Theorie, Abschlussbericht zum  
BMBF-Forschungsvorhaben 02 C 0720, Professur für Aufbereitung, Deponie-  
technik und Geomechanik, Clausthal-Zellerfeld.
- [MAD 87] Madsen F. T., Müller-Vonmoos M. (1987): Das Quellverhalten der Tone. Ta-  
gungsband Tonmineralogie und Bodenmechanik, 15. Mai 1987, ETH Zürich,  
Schweiz.
- [MIE 55] Mielenz R. C.; King, M. E. (1955): Physical mechanical properties and enginee-  
ring performance of clays. California Division of Mines Bulletin, Clays and Clay  
Technology: 1st National Conference on Clays and Clay Technology, Berkeley,  
California 169 (1955), 196-254.
- [MIL 90] Miller S. E., Low, P. F. (1990): Characterization of the electrical double layer of  
montmorillonite, Langmuir (6), 572-578.

- [MIT 93] Mitchell J. (1993): Fundamentals of soil behaviour. 2nd edn. John Wiley & Sons.
- [MOO 07] Moog H. C., Keesmann, S. (2007): Modellierung des reaktiven Stofftransports im Nahfeld eines Endlagers, GRS-225, Abschlussbericht zu einem aus Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) geförderten Vorhaben, Fördernummer 02 E 9723, ISBN 978-3-931995-99-7, 179 Seiten.
- [MOO 97] Moog H. C. (1997): Untersuchungen zum K/Ca-Austausch an den Tonmineralen Montmorillonit und Vermiculit. Von der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften genehmigte Dissertation.
- [MOO 98] Moog, H. C., Streck, T., Cammenga, H. K. (1998): Modeling Ca/K ex-change kinetics on montmorillonite and vermiculite, Soil Science 163(5), 382-393.
- [MÜL 99] Müller-Lyda, I.; Birthler, H.; Fein, E.: Ableitung von Permeabilitäts-Porositätsrelationen für Salzgrus. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-148, 74 S., Köln, 1999.
- [NOO 82] Noorishad J., Ayaollahi M. S., Witherspoon P. (1982): A finite-element method for coupled stress and fluid flow analysis in fractured rock masses, Int. J. Rock Mech. Min. Sci. (19), 185-193.
- [NOR 55] Norrish K. (1955): Manner of swelling of montmorillonite. Nature (4397), 256-257.
- [PFE 90] Pfeifle (1990): Consolidation, Permeability and Strength of Salt/Bentonite Mixtures with Application to the WIPP (SAND 90-7009), Sandia National Laboratories.
- [PFE 98] Pfeifle T. W., Brodsky N. S., Munson D. E. (1998): Experimental Determination of the Relationship Between Permeability and Microfracture-Induced Damage in Bedded Salt, Conference: 12. international conference on computational methods in water resources, Heraklion (Greece), 15-19 Jun 1998; Other Information: PBD: Mar 1998.
- [PUS 08] Pusch G., Meyn R., Popp T., Werunsky F. (2008): Abschlussbericht „Modellentwicklung zur Gaspermeation aus unterirdischen Hohlräumen im Salzgebirge“, Förderkennzeichen 02 C 0952, September 2008, Clausthal-Zellerfeld.



- [QUI 97] Quirk J. (1997): Application of double-layer theories to the extensive crystalline swelling of Li-Montmorillonite, *Langmuir* (13), 6241-6248.
- [RUT 08] Rutqvist, J., Barr, D., Birkholzer, J. T., Chijimatsu, M., Kolditz, O., Liu, Q., Oda, Y., Wang, W. and Zhang, C. (2008): Results from an International Simulation Study on Coupled Thermal, Hydrological, and Mechanical Processes near Geological Nuclear Waste Repositories. *J. Nuclear Technology* (163,1), 101-109.
- [RUT 09] Rutqvist, J., Barr, D., Birkholzer, J. T., Fujisaki, K., Kolditz, O., Liu, Q.-S., Fujita, T., Wang, W., Zhang, C.-Y. (2009): A comparative simulation study of coupled THM processes and their effect on fractured rock permeability around nuclear waste repositories, *Environmental Geology*, online first (DOI: 10.1007/s00254-008-1552-1).
- [SAT 09] Sato, H. (2009): A thermodynamic approach on the effect of salt concentration on swelling pressure of water-saturated bentonite. In: Neil, C., Hyatt, David A., Pickett, Raul B., Rebak (eds.) *Scientific Basis for Nuclear Waste Management XXXII, MRS Proceedings Volume 1124* (DOI: 10.1557/PROC-1124-Q07-11).
- [SEE 62] Seed H. B., Woodward R. J., Lundgren, R. (1962): Prediction of swelling potential for compacted clays, *J. Soil Mechanics and Foundation Division* (88), 53-87.
- [SHA 09] Shao, H., Kolditz, O., Kulik, D. A., Pfingsten, W., Kosakowski, G. (2009): Reactive transport of multiple non-ideal solid solutions, *Applied Geochemistry*, accepted.
- [SJA 87] Sjaardema, G. D. und Krieg, R. D., (1987): A Constitutive Model for the Consolidation of WIPP Crushed Salt and Its Use in Analyses of Backfilled Shaft and Drift Configurations, SAND87-1977, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM.
- [SPO 81] Sposito, G. (1981): *The Thermodynamics of Soil Solutions*, Oxford University Press.
- [SRI 90] Sridharan, A. (1990): Strength and volume change behaviour of a sand-bentonite mixture, *Can. Geotech. J.* (27), 404.
- [STÜ 96] Stührenberg D., Zhang C. (1996): Kompaktionsverhalten von trockenem Salzgrus, BGR Hannover, Kali und Steinsalz (12, 3).

- [STU 96] Stumm, W., Morgan, J. J. (1996): Aquatic Chemistry (3<sup>rd</sup>. edition, Wiley, New York.
- [VER 48] Verwey, E.; Overbeek, J. (1948): Theory of the stability of lyophobic colloids, Elsevier, Amsterdam.
- [VOI 08] Voigt, W., Wollmann, G., Moog, H. C., Hagemann, S. (2008): The THEREDA database for modelling of solubilities in the hexary oceanic salt system Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, Cl<sup>-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> – H<sub>2</sub>O, 13. International Symposium on Solubility Phenomena, Dublin.
- [WAN 06] Wang, W., Datcheva, M., Schanz, T., Kolditz, O. (2006): A sub-stepping approach for elasto-plasticity with rotational hardening, Computational Mechanics (37,3), 266-278.
- [WAN 07a] Wang W., Kolditz O. (2007): Object-oriented finite element analysis of thermo-hydro-mechanical (THM) problems in porous media, Int. J. Numerical Methods in Engineering (69, 1), 162-201, DOI:10.1002/nme.1770.
- [WAN 07b] Wang, W., Walsh, R., Shao, H., Xie, M., Kolditz, O. (2007): Simulation of long term thermal, hydraulic and mechanical interaction between buffer and salt host rock. Proceedings of the 6th Conference on the Mechanical Behavior of Salt 'SALTMECH6' – The Mechanical Behavior of Salt – Understanding of THMC Processes in Salt, pp. 201-208 (SCOPUS).
- [WAN 09a] Wang W. and Kolditz O. (2009): Sparse objects for parallel finite element simulations. Parallel Computing, submitted.
- [WAN 09b] Wang W., Kosakowski, G. and Kolditz, O. (2009): A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media, Computers & Geosciences, online first (DOI: 10.1016/j.cageo 2008.07.07).
- [WER 07] Werunsky, F., Hou, Z., Moog, H. C. (2007): Coupled modelling of the C: HM behaviour of self healing salt based backfill. The mechanical behaviour of salt, Seite 269 ff, ISBN 13: 978-0-415-44398-2, Taylor & Francis Group, London.

- [XIE 04] Xie, M., Agus, S. S., Schanz, T., Kolditz, O. (2004): An Upscaling Method and Numerical Modelling of Swelling/Shrinking Processes in Compacted Bentonite/Sand Mixtures, *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.* (28, 15), 1479-1502.
- [XIE 06] Xie, M., Shao, H., Kolditz, O. (2006): Numerical simulation of non-isothermal reactive transport processes of dual geochemical systems in FEBEX-type repositories, *Proceedings of the 11th International High Level Radioactive Waste Management Conference, IHLRWM, 2006, (SCOPUS)* pp. 663-668.
- [XIE 07a] Xie, M., Moog, H. C., Wang, W., Herbert, H.-J., Shao, H., Kolditz, O. (2007b): Reactive transport modelling in salt material based on Gibbs energy minimization, *Proceedings of the 6th Conference on the Mechanical Behaviour of Salt 'SALTMECH6' – The Mechanical Behaviour of Salt – Understanding of THMC Processes in Salt*, pp. 277-284 (SCOPUS).
- [XIE 07b] Xie, M., Wang, W., de Jonge, J. and Kolditz, O. (2007a): Numerical modeling of swelling pressure in unsaturated expansive elasto-plastic porous media, *Transport in Porous Media* (66, 3), 311-339, DOI 10.1007/s11242-006-0013-0.
- [ZHA 93] Zhang, C., Schmidt, M. W., Staupendahl, G., Heemann, U. (1993): Entwicklung eines Stoffansatzes zur Beschreibung des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus, *Bericht Nr. 93-73*, ISBN 3-926031-73-5, Braunschweig.



## Abbildungsverzeichnis

|           |   |    |
|-----------|---|----|
| Abb. 2.1  | Konzeptmodell für Quell- und Schrumpfungsprozesse in expansiven Materialien, Änderung der Interlayer-Porosität .....  | 12 |
| Abb. 2.2  | Konzeptmodell für behindertes Quellen (Quelldruck) .....  | 13 |
| Abb. 2.3  | Ergebnisse der Quelldruckberechnungen, Spannungsverteilungen, plastische Verzerrung und Verschiebungen .....  | 17 |
| Abb. 2.4  | Na-belegter Ton, jeweils gleiche Einwaage: Links thermisch getrocknet (OD), rechts gefriergetrocknet (FD) .....   | 20 |
| Abb. 2.5  | Quelldruckmesszelle .....   | 21 |
| Abb. 2.6  | Quelldrucke mit reiner NaCl-Lösung .....  | 23 |
| Abb. 2.7  | Vergleich von experimentell ermittelten mit modellierten Quelldrucken .....   | 25 |
| Abb. 3.1  | Grafische Erläuterung mit Beispielrechnung zu Tab. 3.2 .....  | 33 |
| Abb. 3.2  | Links: Konstruktionsschema der für die Messung von Quelldrücken von Tongestein benutzen Zelle. Rechts: Foto einer der von der GRS benutzen Zellen für die Herstellung von SVV-Prüfkörpern vom Typ 2 ..... | 39 |
| Abb. 3.3  | Foto des nicht ausgehärteten Bereichs in der Nähe der Einlassöffnung .....  | 42 |
| Abb. 3.4  | Schematische Darstellung der SVV-Anlage an der TUC .....  | 43 |
| Abb. 3.5  | Links: Aufbau der Zelle der TUC, Rechts: Gesamtbild der SVV-Anlage mit den zehn Zellen .....  | 44 |
| Abb. 3.6  | Links: kavernöser Prüfkörper (SVV109); Rechts: äußerlich sehr homogener Prüfkörper (SVV111) .....   | 45 |
| Abb. 3.7  | Schematische Darstellung des zeitlichen Verhaltens von eingedrungener Lösung (oben) und Kristallisationsdruck (unten) .....   | 46 |
| Abb. 3.8  | Zeitlicher Verlauf des Kristallisationsdrucks mit und ohne Temperaturschwankungen von drei Prüfkörpern der GRS .....  | 48 |
| Abb. 3.9  | Durch Anmischen hergestellter Prüfkörper SVV201 (aufgesägt) .....   | 51 |
| Abb. 3.10 | Schüttbehälters mit einer runden Innenkammer und einem Ringraum für SVV und NaCl-Lösung .....   | 53 |
| Abb. 3.11 | Prüfkörper SVV220; bei der Herstellung kam es zum Kochen der Probe und durch die zustandsänderungsbedingte Volumenausdehnung zu Zugspannungen, die den Prüfkörper in mehrere Stücke zerteilt haben .....  | 53 |
| Abb. 3.12 | 2500 kN-Druckprüfanlagen der Professur für Deponietechnik und Geomechanik .....   | 55 |
| Abb. 3.13 | Definition von Kurzzeitbruchfestigkeit und Bruchstauchung bei TC-Versuchen .....  | 58 |

|           |   |    |
|-----------|---|----|
| Abb. 3.14 | Prinzipskizze der Dilatanz- und Ultraschallwellenmessung .....  | 58 |
| Abb. 3.15 | Festlegung der Dilatanzfestigkeit auf der Grundlage der<br>Volumenverzerrung.....   | 59 |
| Abb. 3.16 | Definition der Dilatanzfestigkeit auf der Grundlage der<br>Ultraschallwellenlaufzeiten .....  | 60 |
| Abb. 3.17 | Spannungsverzerrungskurve von Prüfkörper SVV002 .....   | 64 |
| Abb. 3.18 | Spannungsverzerrungsverhalten von Prüfkörper SVV003 .....   | 64 |
| Abb. 3.19 | Prüfkörper SVV002 (links), mit sprödem und Prüfkörper SVV003 (rechts)<br>mit duktilem Materialverhalten vor den Triaxialversuchen .....                     | 65 |
| Abb. 3.20 | Gemessenen Spitzenfestigkeiten der Prüfkörper von der GRS und der<br>TUC .....  | 66 |
| Abb. 3.21 | Gemessene Spitzenfestigkeiten der Prüfkörper der GRS und der TUC bei<br>5 MPa Manteldruck in Abhängigkeit von ihrem Alter .....                             | 69 |
| Abb. 3.22 | Gemessene Bruchverformungen der Prüfkörper von der GRS und der TUC<br>bei 5 MPa Manteldruck in Abhängigkeit von ihrem Alter .....                           | 69 |
| Abb. 3.23 | Spitzenfestigkeit in Abhängigkeit vom Manteldruck der angemischten<br>Prüfkörper .....  | 71 |
| Abb. 3.24 | Ablauf des Kompressionsversuches SVV272.....  | 72 |
| Abb. 3.25 | Spannungs-Verformungskurve des Kompressionsversuches SVV272 .....   | 73 |
| Abb. 3.26 | Zeitstandprüfer des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik .....   | 74 |
| Abb. 3.27 | Spannungs-Zeit-Diagramm TCc-Versuch Asse-223.....   | 78 |
| Abb. 3.28 | Verzerrung und Verzerrungsrate in Abhängigkeit von der Versuchszeit<br>(TCc-Versuch Asse-223) .....   | 79 |
| Abb. 3.29 | Dilatanz in Abhängigkeit von der Versuchszeit (TCc-Versuch Asse-223) .....  | 79 |
| Abb. 3.30 | Ultraschallwellengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Versuchszeit<br>(TCc-Versuch Asse-223) .....   | 80 |
| Abb. 3.31 | Manteldruck abhängige Spitzenfestigkeit; bis ca. 1 MPa ist<br>näherungsweise eine lineare Abnahme zu beobachten, danach bricht sie<br>signifikant ein ..... | 82 |
| Abb. 3.32 | Kriechversuch am Prüfkörper SVV273 mit Belastungsablauf sowie Axial-<br>und Volumenverzerrung.....  | 84 |
| Abb. 3.33 | Versuch SVV274 mit gemessenen Axial- und Volumenverzerrungen sowie<br>der gemessene (Raum)Temperatur.....   | 85 |
| Abb. 3.34 | Messung der Stickstoff-Ausgangspерmeabilität des Prüfkörpers SVV235<br>( $K < 10^{-20} \text{ m}^2$ ) .....   | 90 |
| Abb. 3.35 | Messung der Permeabilität nach Vorschädigung .....  | 91 |

|           |   |     |
|-----------|---|-----|
| Abb. 3.36 | Während des gesamten Versuchsablaufes findet eine Kompaktion des Prüfkörpers statt, auch bei einer Reduzierung der isostatischen Belastung auf $\sigma_i = 4 \text{ MPa}$ .....   | 92  |
| Abb. 3.37 | Verlauf der gemessenen NaCl-Lösungs-Permeabilität am Prüfkörper SVV235.....   | 93  |
| Abb. 3.38 | Horizontalschnitt durch den Prüfkörper SVV235 in (oben) 66 mm bzw. (unten) 92 mm Abstand von der Endfläche .....  | 97  |
| Abb. 3.39 | Horizontalschnitt durch Prüfkörper SVV227 in (oben) 52 mm bzw. (unten) 62 mm Abstand von der Endfläche.....   | 98  |
| Abb. 4.1  | Gemessene und durch numerische Lösung der Stoffmodellgleichung ermittelte Axialverzerrungen der Versuche SVV273, SVV274 und SVV275, Materialparameter nach Tab. 11.3.....   | 106 |
| Abb. 4.2  | Gemessene und durch numerische Lösung der Stoffmodellgleichung ermittelte Volumenverzerrungen der Versuche SVV273, SVV274 und SVV275, Materialparameter nach Tab. 11.3.....   | 106 |
| Abb. 4.3  | Ausschnitt aus den Messkurven des Versuches SVV235 .....  | 108 |
| Abb. 4.4  | Gegenüberstellung der aus den Triaxialpermeametermessungen abgeleiteten Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung .....   | 110 |
| Abb. 5.1  | Schematische Darstellung der Kopplung von EQLink an MISES3 .....  | 116 |
| Abb. 5.2  | Lösungsmengenabhängige Mineralphasen und ihre Massen beim homogenen Aufsättigungsprozess in einer Referenzzone .....  | 122 |
| Abb. 5.3  | Entwicklung des Festphasenvolumens bei der homogenen Simulation des Aufsättigungsprozesses.....   | 122 |
| Abb. 5.4  | Schematische Darstellung des Simulationsmodells .....   | 124 |
| Abb. 5.5  | Entwicklung der Mineralphasenmassen in der ersten der 20 Zonen über eine Aufsättigungszeit von 40 (fiktiven) Tagen (in den ersten Schritten ist die Entwicklung identisch wie bei der Simulation einer homogenen Aufsättigung)..... | 124 |
| Abb. 5.6  | Endphasenbestand in den einzelnen Zonen .....   | 125 |
| Abb. 5.7  | Endvolumina der 20 Zonen.....   | 128 |
| Abb. 5.8  | Modell zur Simulation der Aufsättigung eines 10 m langen Bohrlochs mit FLAC3D .....   | 129 |
| Abb. 5.9  | Vergleich der Aufsättigungszeiten bei numerischer Simulation mit einer analytischen Lösung .....  | 130 |
| Abb. 5.10 | Skizze zur Veranschaulichung der Umrechnung von Volumenvergrößerung in Druckaufbau (Gleichung (5.3)).....   | 136 |

|           |  |     |
|-----------|--|-----|
| Abb. 5.11 | Schematische Darstellung der geplanten Simulation des<br>Aufsättigungsprozesses.....   | 138 |
| Abb. 5.12 | Mögliche Zusammenführung von Messdaten aus Festigkeitsversuchen<br>und der Prüfkörperherstellung mit den simulierten Volumina, um den<br>Kristallisationsdruck zu berechnen und an den Laborversuchen zu<br>validieren ..... | 140 |
| Abb. 5.13 | Schematische Skizze der Wechselwirkung C:HM über die entsprechenden<br>Parameter .....   | 143 |
| Abb. 6.1  | Geometrisches Modell für die Bohrlochlagerung .....  | 153 |
| Abb. 6.2  | Primärspannungszustand .....   | 163 |
| Abb. 6.3  | Verschiebungen in x-Richtung .....   | 163 |
| Abb. 6.4  | Verschiebungen in z-Richtung .....   | 164 |
| Abb. 6.5  | Verlauf des Konturschnittes von 0° bis 180° .....  | 164 |
| Abb. 6.6  | Verlauf der Gitterpunktverschiebungen entlang der Streckenkontur .....   | 165 |
| Abb. 6.7  | Verlauf der Koordinatenspannungen entlang der Streckenkontur .....   | 166 |
| Abb. 6.8  | Verlauf der analytisch berechneten Verzerrungen eines idealen Würfels<br>und der von FLAC3D berechneten Verzerrungen in Zone 1467 bei gleicher<br>Beanspruchung.....   | 167 |
| Abb. 6.9  | Lokalisation der Schnitte entlang der Bohrlochkontur in die Teufe.....   | 168 |
| Abb. 6.10 | Radialspannungen in den Konturzonen bei $\alpha = 0^\circ$ zu unterschiedlichen<br>Zeitpunkten (Vertikalschnitt) .....   | 171 |
| Abb. 6.11 | Berechnete Radialspannungen in den Konturzonen bei $\alpha = 0^\circ$ zu<br>unterschiedlichen Zeitpunkten (Vertikalschnitt) .....  | 172 |
| Abb. 6.12 | Radialspannungen in einem Horizontalschnitt in $\alpha = 90^\circ$ -Richtung in einer<br>Bohrlochteufe von 11 m.....   | 172 |
| Abb. 6.13 | Deviatorspannungen (Von Mises Spannungen) in den Konturzonen bei<br>$\alpha = 0^\circ$ zu unterschiedlichen Zeitpunkten (Vertikalschnitt).....   | 173 |
| Abb. 6.14 | Verschiebungen in z-Richtung entlang der Bohrlochkontur bei $\alpha = 0^\circ$ .....   | 174 |
| Abb. 6.15 | (Radialverschiebungen) Verschiebungen in y-Richtung entlang der<br>Bohrlochkontur bei $\alpha = 0^\circ$ .....   | 175 |
| Abb. 6.16 | (Radialverschiebungen) Verschiebungen in y-Richtung entlang der<br>Bohrlochkontur bei $\alpha = 90^\circ$ .....  | 175 |
| Abb. 6.17 | Dilatanz in den Konturzonen bei $\alpha = 0^\circ$ (= Streckenachsrichtung) .....  | 176 |
| Abb. 6.18 | Verschiebungen in der x-z-Ebene in der Umgebung der Bohrlochecke (zur<br>Verdeutlichung sind die Verformungen der Zonen in der Darstellung um<br>den Faktor 5 erhöht) .....  | 177 |



|           |   |     |
|-----------|---|-----|
| Abb. 6.19 | Dilatanz in den Konturzonen bei $\alpha = 90^\circ$ (senkrecht zur Streckenachsrichtung) .....  | 178 |
| Abb. 6.20 | Radialspannungen im Versatzmaterial in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs .....  | 179 |
| Abb. 6.21 | Axialspannungen im Versatzmaterial in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs .....   | 179 |
| Abb. 6.22 | Verschiebungen in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs in z-Richtung .....   | 180 |
| Abb. 6.23 | Porosität des Versatzes in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs .....  | 181 |
| Abb. 6.24 | Porosität des Versatzes in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs bei einer erhöhten Gebirgstemperatur von $T = 60^\circ \text{C}$ .....   | 182 |
| Abb. 6.25 | Radialspannungen in den Konturzonen in $\alpha = 90^\circ$ -Richtung .....  | 182 |
| Abb. 6.26 | Deviatorspannungen in den Konturzonen in $\alpha = 0^\circ$ -Richtung .....   | 183 |
| Abb. 6.27 | Dilatanzverläufe in den Konturzonen in $\alpha = 90^\circ$ -Richtung .....  | 184 |
| Abb. 6.28 | Axialspannungen (z-Richtung) in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs .....   | 185 |
| Abb. 6.29 | Porosität des Versatzes in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs .....  | 185 |
| Abb. 6.30 | Porosität des Versatzes in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs bei einer erhöhten Gebirgstemperatur von $T = 40^\circ \text{C}$ .....   | 186 |
| Abb. 6.31 | Radialspannungen in den Konturzonen in $\alpha = 0^\circ$ -Richtung .....   | 187 |
| Abb. 6.32 | Deviatorspannungen in den Konturzonen in $\alpha = 0^\circ$ -Richtung .....   | 188 |
| Abb. 6.33 | Verschiebungen in den Konturgitterpunkten bei $\alpha = 0^\circ$ in y-Richtung .....  | 188 |
| Abb. 6.34 | Dilatanz in den Konturzonen bei $\alpha = 90^\circ$ .....   | 189 |
| Abb. 6.35 | Radialspannungen in den Zonen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs ....  | 190 |
| Abb. 6.36 | Verschiebungen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs in z-Richtung .....  | 190 |
| Abb. 6.37 | Spannungen in z-Richtung in der Vertikalachse des Bohrlochs .....   | 191 |
| Abb. 6.38 | Radialspannungen in den Konturzonen in $\alpha = 0^\circ$ -Richtung bei $T = 60^\circ \text{C}$ .....   | 192 |
| Abb. 6.39 | Radialspannungen in den Konturzonen bei $0^\circ$ .....   | 194 |
| Abb. 6.40 | Dilatanz in den Konturzonen in $\alpha = 90^\circ$ -Richtung .....  | 195 |
| Abb. 6.41 | Verschiebungen entlang der Vertikalachse des Bohrlochs in z-Richtung .....  | 196 |
| Abb. 6.42 | Entwicklung der durchschnittlichen Radialspannung in den Konturzonen in $\alpha = 0^\circ$ -Richtung (y-Richtung) für die verschiedenen Versatzmaterialien und unterschiedliche Gebirgstemperaturen ..... | 197 |

|           |   |     |
|-----------|---|-----|
| Abb. 6.43 | Entwicklung der durchschnittlichen Verschiebung in den Konturzonen in $\alpha = 0^\circ$ -Richtung (y-Richtung) für die verschiedenen Versatzmaterialien und unterschiedliche Gebirgstemperaturen ..... | 198 |
| Abb. 6.44 | Entwicklung der durchschnittlichen Dilatanz in den Konturzonen in $\alpha = 0^\circ$ -Richtung (y-Richtung) für die verschiedenen Versatzmaterialien und unterschiedliche Gebirgstemperaturen .....     | 198 |
| Abb. 6.45 | Entwicklung der durchschnittlichen Porosität entlang der Vertikalachse des Bohrlochs .....  | 199 |
| Abb. 6.46 | Entsprechend den mittleren Porositäten berechnete zeitliche Entwicklung der Permeabilitätsverläufe für Salzgrus und angemischten SVV .....  | 200 |
| Abb. 7.1  | Große zylindrische Salzprüfkörper aus dem Salzbergwerk Asse .....   | 204 |
| Abb. 7.2  | Korngrößenzusammensetzung des eingesetzten SVV-Materials.....   | 205 |
| Abb. 7.3  | Prinzipdarstellung der gekoppelten C:HM-Simulationsversuche an großen Salzring-Versatz-Proben in der GRS-Triaxialprüfanlage .....   | 206 |
| Abb. 7.4  | Links: Druckkissen für Druckmessung im SVV-Material; Rechts: PT100 für Temperaturmessung im SVV-Material im Bohrloch.....   | 207 |
| Abb. 7.5  | Instrumentierung und Probeneinbau .....   | 208 |
| Abb. 7.6  | Prinzipdarstellung des Vorversuchs am großen SVV-Salz-Prüfkörper CHM0 .....   | 211 |
| Abb. 7.7  | Messergebnisse der Spannungen, Verformungen und Laugeninjektion beim C:HM-Vorversuch am SVV-Salz-Prüfkörper CHM0 .....  | 212 |
| Abb. 7.8  | Ergebnisse der Permeabilitätsmessung am SVV-Salz-Prüfkörper CHM0 .....  | 213 |
| Abb. 7.9  | Fotos des abgeschnittenen SVV-Salz-Prüfkörpers CHM0 .....   | 214 |
| Abb. 7.10 | Reibungsfestigkeit der Kontaktfläche zwischen SVV-Versatz und Salzring .....  | 214 |
| Abb. 7.11 | Messergebnisse der Spannungen, Verformungen, Laugeninjektionsdruck, Druckaufbau und Temperaturänderung im SVV beim Versuch CHM1.....  | 216 |
| Abb. 7.12 | Fotos des ausgebauten SVV-Salz-Prüfkörpers CHM1 .....   | 218 |
| Abb. 7.13 | Versuchsergebnisse CHM2 .....   | 222 |
| Abb. 7.14 | Versuchsergebnisse CHM2 .....   | 223 |
| Abb. 7.15 | Der ausgebaute SVV-Salzprüfkörper CHM2 .....  | 224 |
| Abb. 7.16 | Versuchsergebnisse CHM2. Ermittlung der Gaspermeabilität.....   | 225 |
| Abb. 7.17 | Der SVV-Salzprüfkörper in Segmente zerteilt. Segment 4 war unten (Einströmseite); dort ist die (zerstörte) Druckblase zu erkennen .....   | 225 |
| Abb. 7.18 | Die zerstörte Druckblase als Detailansicht .....  | 226 |
| Abb. 7.19 | Ein Segment des SVV-Salzprüfkörpers in der Detailansicht .....  | 226 |
| Abb. 7.20 | Messung der Kontaktfestigkeit zwischen SVV-Versatz und Salzring .....   | 227 |
| Abb. 7.21 | Röntgendiffraktogramme aller fünf untersuchten Abschnitte .....   | 228 |

|           |  |     |
|-----------|--|-----|
| Abb. 8.1  | Verwendetes geometrisches Modell mit den verschiedenen Materialgruppen .....   | 232 |
| Abb. 8.2  | Geometrische Randbedingungen des Modells in x-y-Richtung (unverschiebbliche Lagerung) .....  | 233 |
| Abb. 8.3  | Belastungsverläufe der Laborversuche CHM1 und CHM2 .....   | 235 |
| Abb. 8.4  | Vergleich zwischen den analytisch berechneten Spannungen und den mit FLAC3D numerisch berechneten Spannungen (Versuch CHM1). ....  | 236 |
| Abb. 8.5  | Vergleich zwischen der gemessenen Axialverzerrung, den Ergebnissen der analytischen Berechnung und den Ergebnissen der numerischen Simulation mit FLAC3D (Stoffmodell Hooke, Stoffmodell LUBBY2 mit und ohne Bohrloch) .....                     | 238 |
| Abb. 8.6  | Messdaten und Berechnungsergebnisse mit dem Stoffmodell LUBBY1 /LUBBY2 ( $E_V = 1000 \text{ MPa}$ ) .....  | 239 |
| Abb. 8.7  | Messdaten und Berechnungsergebnisse der Sensitivitätsanalyse mit Variation des Verformungsmoduls für das Versatzmaterial mit dem Stoffmodell LUBBY1/LUBBY2 im Bereich $E_{SVV} = 0 - 20000 \text{ MPa}$ .....                                    | 240 |
| Abb. 8.8  | Messdaten und Berechnungsergebnisse der Sensitivitätsanalyse mit Variation des Verformungsmoduls für das Steinsalz im Bereich $E_{Salz} = 0 - 20000 \text{ MPa}$ mit dem Stoffmodell LUBBY1/LUBBY2 .....   | 241 |
| Abb. 8.9  | Berechnete Axialverzerrungen des Versuches CHM1 aus einer Berechnung mit dem Stoffmodell LUBBY1/LUBBY2 .....   | 241 |
| Abb. 8.10 | Simulation der Entlastungsphase mit dem Stoffmodell Hooke anstelle des Stoffmodells LUBBY1 im Stoffmodell LUBBY2 → ein Anfangs-E-Modul von $14000 \text{ MPa}$ führt auf eine hinreichende Übereinstimmung von Mess- und Berechnungswerten ..... | 242 |
| Abb. 8.11 | Axiale Verzerrungen, dargestellt für verschiedene Steinsalz-Verformungsmoduli im Bereich von $E_{Salz} = 11.000 - 25.000 \text{ MPa}$ .....  | 243 |
| Abb. 8.12 | Radiale Verzerrungen, dargestellt für verschiedene Steinsalz-Verformungsmoduli im Bereich von $E_{Salz} = 11.000 - 25.000 \text{ MPa}$ .....   | 244 |
| Abb. 8.13 | Relative Fehler der einzelnen Berechnungen in Abhängigkeit vom E-Modul des Steinsalzes $E_{Salz}$ .....  | 248 |
| Abb. 8.14 | Relative Fehler der einzelnen Berechnungen in Abhängigkeit der Poissonzahl von SVV $\nu_{SVV}$ .....   | 249 |
| Abb. 8.15 | Gemessene Axial- und Radialverformungen mit rot markiertem Anfangsbereich .....  | 250 |

|           |   |     |
|-----------|---|-----|
| Abb. 8.16 | Vergleich der gemessenen Axial- und Radialverformungen mit berechneten Axial- und Radialverformungen, des Parametersatzes mit der besten Übereinstimmung in der Anfangsphase .....  | 253 |
| Abb. 8.17 | Vergleich der gemessenen Axial- und Radialverformungen mit berechneten Axial- und Radialverformungen für den Parametersatz mit der besten Übereinstimmung .....   | 254 |
| Abb. 9.1  | Operatorsplitting Algorithmus für die reaktive Transportsimulation (GeoSys-PHREEQC) .....   | 261 |
| Abb. 9.2  | Vergleich der Ionenverteilungen für iso- und nichtisotherme Bedingungen .....   | 262 |
| Abb. 9.3  | Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV. Axialsymmetrisches Modell. Links: Geometrie. Rechts: Finite Element Gitter und Randbedingungen .....  | 264 |
| Abb. 9.4  | Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV. Belastungsgeschichte für Kurzzeitversuche. Radialer Manteldruck mit nachfolgender Axialverschiebung (Verzerrungsgeschwindigkeit: $\dot{\epsilon} = 4,17 \cdot 10^{-5} s^{-1}$ ) .....   | 265 |
| Abb. 9.5  | Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV, Spannungs-Dehnungs-Kurve für die axiale Beanspruchung, Vergleich von linearem (Hooke) und nichtlinearem (LUBBY1) elastischem Materialmodell .....   | 267 |
| Abb. 9.6  | Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV. Spannungs-Dehnungs-Kurve für die axiale Beanspruchung, Nichtlinear-elastisches Materialmodell (LUBBY1), Einfluss unterschiedlicher Materialparameter zur Kalibrierung von Messkurven, Links: $a = 2750 = const$ , Rechts: $n = 1,0 = const$ ..... | 267 |
| Abb. 9.7  | Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV, Belastungsgeschichte für Langzeitkriechverhalten. Radialer Manteldruck mit nachfolgender Druckbelastung in axialer Richtung (jeweils für weitere 20 Tage konstant) .....  | 268 |
| Abb. 9.8  | Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV, Simulation des Kriechverhaltens mit dem BGR-Modell (stationäres Kriechen) .....   | 269 |
| Abb. 9.9  | Triaxiale Kompression von Probekörpern aus SVV, Simulation des Kriechverhaltens mit dem LUBBY2-Modell ohne Schädigung (transientes und stationäres Kriechen) .....  | 270 |
| Abb. 9.10 | 2D-Modell für die Modellierung des reaktiven Stofftransports in einem SVV-Prüfkörper .....  | 271 |
| Abb. 9.11 | Modellierte zeitliche Entwicklung des Mineralphasenbestandes im durchströmten Prüfkörper .....  | 273 |
| Abb. 9.12 | GeoSys-Kopplungen mit chemischen Simulatoren .....  | 275 |
| Abb. 9.13 | Kopplungsschema von GeoSysGEMS (auf Quellcode-Ebene) .....  | 275 |
| Abb. 9.14 | Schema der parallelen finiten Elemente Methode .....  | 276 |

|           |  |     |
|-----------|--|-----|
| Abb. 9.15 | GeoSys-Prozess Objekte.....  | 277 |
| Abb. 9.16 | Verknüpfung des GeoSys-Wikipedia mit dem SubVersion System zum<br>Software-Management.....   | 278 |
| Abb. 9.17 | Einsatz des GeoSys-Wikipedia zum Projektmanagement.....  | 279 |
| Abb. 9.18 | Code-Vergleiche GeoSys-PHREEQC, ChemApp, GEMS .....  | 280 |
| Abb. 9.19 | Rückhaltevermögen in Abhängigkeit von Barium- und Strontiummengen<br>(links) sowie Sulfat (rechts), dargestellt sind die Radiumverteilungen in<br>Abhängigkeit vom Abstand von der Nuklidquelle ( $x = 5\text{ m}$ ) ..... | 281 |
| Abb. 11.1 | Horizontalschnitt bei $l = 107\text{ mm}$ durch den unbeprobten Prüfkörper<br>SVV228 mit deutlich erkennbaren großen Porenräumen, die auf die<br>schlechte Durchmischung zurückzuführen sind .....                         | 292 |
| Abb. 11.2 | Am Prüfkörper SVV-208 gemessene Spannungsverzerrungskurve mit<br>elastischen und plastischen Anteilen sowie der berechneten<br>Verzerrungskurve des Stoffmodells LUBBY1 .....  | 295 |
| Abb. 11.3 | Messkurven der Prüfkörper SVV273 – SVV275 und die Ergebnisse der<br>analytischen Berechnungen .....  | 298 |
| Abb. 11.4 | Gemessene Spitzenfestigkeiten für SVV in Abhängigkeit von der<br>Minimalspannung und Näherungsfunktion .....   | 299 |



## Tabellenverzeichnis

|          |  |     |
|----------|--|-----|
| Tab. 2.1 | Oberflächenbelegung der für die Quelldruckversuche eingesetzten Tone .....   | 19  |
| Tab. 2.2 | Quelldrucke mit reiner NaCl-Lösung unterschiedlicher Konzentration .....   | 23  |
| Tab. 2.3 | Materialeigenschaften von MX-80 (nach [XIE 07b]) .....   | 24  |
| Tab. 3.1 | Chemische Reaktionen, die die Anlagerung von Wassermolekülen an<br>Magnesiumsulfat beschreiben .....   | 32  |
| Tab. 3.2 | Volumina der Produkte und Edukte der wichtigsten Reaktionen bei der<br>Aufsättigung von $MgSO_4$ mit NaCl-Lösung .....   | 33  |
| Tab. 3.3 | Phasenumwandlungen, die während längerer Standzeiten als Folge der<br>Umlagerung von Wassermolekülen innerhalb des Prüfkörpers auftreten<br>könnten .....  | 35  |
| Tab. 3.4 | Daten der zwei Prüfkörpertypen von der GRS.....  | 38  |
| Tab. 3.5 | Übersicht über die von der GRS und der TUC durch künstliche Flutung<br>hergestellten Prüfkörper .....  | 61  |
| Tab. 3.6 | Minimal- und Maximalwerte verschiedener Parameter der Prüfkörper von<br>der GRS und der TUC .....  | 67  |
| Tab. 3.7 | Vergleich der Prüfkörperlänge am Ende der Versuche mit der gemessenen<br>Prüfkörperlänge nach dem Ausbau der Prüfkörper .....  | 86  |
| Tab. 3.8 | Ergebnisse der Ultraschalluntersuchung und die bestimmten Dichte des<br>Prüfkörpers SVV276 bei zwei verschiedenen Abmessungen.....   | 95  |
| Tab. 4.1 | Materialparameter für das Stoffmodell Korthaus/Hein für angemischten<br>SVV und vergleichend für Salzgrus .....  | 105 |
| Tab. 5.1 | Qualitativer Vergleich der ermittelten Phasenbestände an Einlass- und<br>Auslassseite der Prüfkörper aus der Mineralanalyse von der GRS und aus<br>der Simulation einer inhomogenen Aufsättigung ..... | 126 |
| Tab. 5.2 | Übersicht über den Kenntnisstand der wichtigsten Parameter zu Beginn,<br>während und am Ende der Aushärtung .....  | 145 |
| Tab. 6.1 | Zeitliches Ablaufschema für die Simulation der Bohrlochlagerung mit<br>Bohrlochverschluss.....   | 151 |
| Tab. 6.2 | Auflistung der in den Schnitten dargestellten Zustandsgrößen .....   | 169 |
| Tab. 7.1 | Physikalische Eigenschaften der Salzprüfkörper.....  | 205 |
| Tab. 7.2 | Korngrößenzusammensetzung des verwendeten SVV-Materials .....  | 205 |
| Tab. 7.3 | Verlauf des Simulationsversuchs II an SVV-Salz-Prüfkörper CHM1 .....   | 215 |
| Tab. 7.4 | Verlauf des Simulationsversuchs III an SVV-Salz-Prüfkörper CHM2 .....  | 219 |
| Tab. 7.5 | Reibungsfestigkeit der Kontaktfläche zwischen SVV und Salzring .....   | 227 |

|           |   |     |
|-----------|---|-----|
| Tab. 7.6  | Röntgendiffraktometrisch nachgewiesene Mineralphasen im SVV. Zahlen kennzeichnen mol Wasser pro Formeleinheit $\text{MgSO}_4$ .....   | 228 |
| Tab. 8.1  | Materialkennwerte für das Hooke Stoffmodell für trockenen SVV, Asse-Steinsalz und Stahl .....   | 233 |
| Tab. 8.2  | Materialkennwerte für das Stoffmodell LUBBY1 für Asse-Steinsalz ([LUX 84]).....   | 234 |
| Tab. 8.3  | Materialkennwerte für das Stoffmodell HOU/LUX-phs für Asse-Steinsalz [EBZ 06] .....   | 234 |
| Tab. 8.4  | Überblick über die Variationsparameter mit Zahlenwerten .....   | 245 |
| Tab. 8.5  | Übersicht über die elastischen Variationsparameter für Steinsalz und SVV ....   | 247 |
| Tab. 8.6  | Die optimalen, durch Iteration ermittelten Parameter ausgehend von unterschiedlichen Anfangsparametern .....  | 251 |
| Tab. 8.7  | Liste der variierten Parameter unter Berücksichtigung des elastischen Materialverhaltens von Steinsalz und SVV sowie der Kompaktion des SVV und des Kriechens des Steinsalzes ..... | 252 |
| Tab. 8.8  | Auflistung des Parametersatzes mit der besten Übereinstimmung zwischen Mess- und Berechnungswerten .....  | 254 |
| Tab. 9.1  | Mineralphasen, die sich bei der Umsetzung von SVV mit gesättigter NaCl-Lösung bilden können und ihre Molvolumina .....  | 273 |
| Tab. 11.1 | Ergebnisse der chemischen Analysen der durch den Prüfkörper SVV 228 geströmten Lösungen .....   | 292 |
| Tab. 11.2 | Chemische Bestandteile der Gleichgewichtslösung .....   | 292 |
| Tab. 11.3 | Übersicht über die ermittelten Stoffmodellparameter für die Stoffmodelle Hooke und LUBBY1 .....   | 296 |
| Tab. 11.4 | LUBBY2 Parameter für angemischten SVV.....  | 297 |



## Veröffentlichungen

Görke, U.-J., Wang, W., Kolditz, O. (2009), Preparation and implementation of the HOU/LUX material model for complex rate dependent material behavior of rock salt, Internal report, UFZ Leipzig 2009.

Xie, M., Wang, W., de Jonge, J. and Kolditz, O. (2007): Numerical modeling of swelling pressure in unsaturated expansive elasto-plastic porous media. *Transport in Porous Media*, DOI 10.1007/s11242-006-0013-0, volume 66 (3): 311-339.

Xie, M., Moog, H.C., Wang, W., Herbert, H.-J., Shao, H., Kolditz, O. (2007): Reactive transport modelling in salt material based on Gibbs energy minimization, *Proceedings of the 6th Conference on the Mechanical Behavior of Salt 'SALTMECH6' – The Mechanical Behavior of Salt – Understanding of THMC Processes in Salt*, pp. 277-284 (SCOPUS).

Shao, H., Dmytrieva, S.V., Kolditz, O., Kulik, D.A., Pfingsten, W., Kosakowski, G. (2009): Modeling reactive transport in non-ideal aqueous-solid solution system. *Applied Geochemistry* 24(7):1287-1300.

Wang, W. and Kolditz, O. (2007): Object-oriented finite element analysis of thermo-hydro-mechanical (THM) problems in porous media, *Int. J. Numerical Methods in Engineering*, vol. 69 (1): 162-201, DOI:10.1002/nme: 1770.

Wang, W., Walsh, R., Shao, H., Xie, M., Kolditz, O. (2007): Simulation of long term thermal, hydraulic and mechanical interaction between buffer and salt host rock. *Proceedings of the 6th Conference on the Mechanical Behavior of Salt 'SALTMECH6' – The Mechanical Behavior of Salt – Understanding of THMC Processes in Salt*, pp. 201-208 (SCOPUS).

Wang, W., Kosakowski, G. and Kolditz, O. (2009): A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media. *Computers & Geosciences*, DOI: 10.1016/j.cageo: 2008.07.007.

**Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) mbH**

Schwertnergasse 1  
**50667 Köln**  
Telefon +49 221 2068-0  
Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum  
**85748 Garching b. München**  
Telefon +49 89 32004-0  
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200  
**10719 Berlin**  
Telefon +49 30 88589-0  
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4  
**38122 Braunschweig**  
Telefon +49 531 8012-0  
Telefax +49 531 8012-200

**[www.grs.de](http://www.grs.de)**

**Technische Universität Clausthal  
Institut für Aufbereitung, Deponie-  
technik und Geomechanik**

Erzstraße 20  
38678 Clausthal-Zellerfeld

**Eberhard Karls Universität Tübingen  
Zentrum für Angewandte Geowissen-  
schaften (ZAG)**

Sigwartstraße 10  
72076 Tübingen

**Helmholtz-Zentrum für Umwelt-  
forschung (UFZ)**

Permoser Straße 15  
04317 Leipzig

**ISBN 978-3-939355-26-7**