

THM-Prozessentwicklung von Tonstein unter Endlagerbedingungen



Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH

THM-Prozessentwicklung von Tonstein unter Endlagerbedingungen

Gerd Frieling Jens Eckel Holger Seher

Januar 2019

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrundeliegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU) unter dem Kennzeichen 4716E03230 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

Kurzfassung

Tonstein wird neben Salz- und Kristallingestein als potentiell geeignetes Wirtsgestein zur Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in Deutschland in Betracht gezogen. Zudem wird Tonstein als Material zur Erstellung geotechnischer Barrieren verwendet. Im Allgemeinen soll Tonstein die Isolation schadstoffbelasteter Fluide durch seine günstigen abdichtenden Materialeigenschaften im Endlager gewährleisten. Diese günstigen Materialeigenschaften können durch Prozesse in der Betriebs- (z. B. Auffahren der Grubenhohlräume) und Nachbetriebsphase bzw. nach Verschluss des Endlagers (z. B. thermischer Eintrag durch die Abfallgebinde) beeinflusst werden.

Die vorliegende Arbeit gibt zunächst eine Übersicht über das Prozessverhalten von Ton/Tonstein aus gebirgsmechanischer und endlagerrelevanter Sicht. Hierbei soll die theoretische Basis aufgezeigt werden, welche Prozesse im Ton/Tonstein in der Betriebs- und Nachbetriebsphase aus integritätsrelevanter Sicht ablaufen.

Diese Sachstandserhebung dient insbesondere zum Verständnis des komplexen hydraulisch-mechanischen Materialverhaltens von Tonstein. Aufbauend auf diesem Verständnis wird untersucht, welche Stoffmodelle geeignet sind das komplexe hydraulischmechanische Materialverhalten abzubilden. Die Erstellung solcher Stoffmodelle und deren geeignete Parametrisierung, stellt eine große Herausforderung zum Nachweis der Langzeitsicherheit insbesondere in der Nachverschlussphase eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle im Tonstein dar.

Abstract

In addition to salt and crystalline rocks, clay is considered as a potentially suitable host rock for the disposal of heat-generating radioactive waste in Germany. In addition, claystone is used as a material for creating geotechnical barriers. In general, claystone should ensure the insulation of contaminated fluids through its favorable sealing material properties in the repository. These favorable material properties can be influenced by processes in the operational (for example, driving up the pit cavities) and after-operation phase or after closure of the repository (for example thermal input by the waste packages).

The present work first gives an overview of the process behavior of claystone from rock mechanic and repository relevant view. Here, the theoretical basis is shown, which

processes in the claystone in the operating and post-operational phase run from an integrity-relevant point of view.

Based on this understanding, it is investigated which material models are suitable for simulating the complex hydraulic-mechanical material behavior of claystone. The creation of such material models and their appropriate parameterization, represents a major challenge to prove the long-term safety of a repository for heat-generating radioactive waste in claystone.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
1	Einführung	1
1.1	Integritätsnachweis im Tonstein	2
1.2	Tonsteinformationen in Deutschland	3
1.3	Tonsteinformationen im internationalen Vergleich	5
2	Materialeigenschaften und Prozessentwicklung während de	r
	Betriebs-, Übergangs- und Langzeitphase im Tonstein	9
2.1	Einführung	9
2.2	Prozessentwicklung	12
2.2.1	Betriebsphase	13
2.2.2	Nachverschlussphase	16
2.3	Beschreibung der Prozesse und Eigenschaften	17
2.3.1	Fluidströmung (advektiver Transport)	18
2.3.2	Diffusion und Dispersion	22
2.3.3	Geomechanisches Verhalten	23
2.3.4	Quellprozess	
2.3.5	Adsorption	
2.3.6	Gasbildung	
2.3.7	Geochemische Prozesse	
2.3.8	Thermisches Verhalten	
3	Material/Stoffmodelle Ton(-gestein)	41
3.1	Einführung	41
3.1.1	Relevante Prozesse	43
3.1.2	Spannungs-Verformungsverhalten von Tonstein	46
3.2	Materialverhalten von Opalinuston und COx-Tonstein	
3.2.1	Opalinuston	50
3.2.2	COx-Tonstein	

3.3	Stoffmodell-Klassen/Kategorien	55	
3.3.1	Elastische Stoffmodelle		
3.3.2	Elastisch-plastische Stoffmodelle		
3.3.3	Zeitabhängige Stoffmodelle		
3.4	Beispiele für Stoffmodelle bzw. Projekte		
3.4.1	Modellrechnungen der NAGRA Schweiz		
3.4.2	Stoffmodell Hou/Lux-T	85	
3.4.3	Barcelona Basic Model		
3.4.4	Modell nach Souley		
4	Zusammenfassung		
4.1	Allgemeines zu Stoffmodellen		
4.2	Ansätze zur Beschreibung eines viskosen Materialverhaltens		
4.3	Abschließende Bemerkungen zum BBM-Model		
5	Schlussfolgerung und Ausblick		
5.1	Empfehlungen		
	Literaturverzeichnis	101	
	Abbildungsverzeichnis	123	
	Tabellenverzeichnis	127	
Α	Konstitutive Modelle in verschiedenen Programmen	129	
A.1	FLAC3D Version 6.0 /ITA 18/	130	
A.2	COMSOL /COM 15/, /COM 18/	141	
A.3	CODE_BRIGHT	142	
A.4	ABAQUS	145	
A.5	PLAXIS	146	
A.6	ANSYS	147	
A.7	OpenGeosys	148	
A.8	Code_Aster/salome_meca	149	

В	Materialkennwerte Tonstein	151
B.1	Wassergehalt	151
B.2	Dichte und Porosität	151
B.3	Permeabilität, Durchlässigkeitsbeiwert und Transmissivität	152
B.4	Diffusion	153
B.5	Zweiphasenfluss	153
B.6	Sorption	155
B.7	Eigenschaften der Lösung	156
B.8	Gesteinsmechanische Parameter	156
С	Glossar	163

1 Einführung

Die Arbeiten im vorliegenden Bericht wurden im Arbeitspaket 1.1 (Integritätsnachweis Ton/Tonstein) des Vorhabens "Ableitung von Szenarien für die Langzeitphase von Endlagersystemen in verschiedenen Wirtsgesteinen sowie Integritätsnachweis für die Wirtsgesteine Ton/Tonstein und Kristallin" (FKZ 4716E03230) durchgeführt.

Ziel des Vorhabens ist, den Stand von Wissenschaft und Technik zur Überprüfung der Integrität der Wirtsgesteine Tonstein und Kristallin, zu untersuchen. Die Arbeiten wurden initiiert, da in Deutschland zur Endlagerung hochradioaktiver und wärmeentwickelnder Abfälle bislang hauptsächlich Salzformationen in entsprechender Endlagertiefe untersucht wurden. Durch den Neustart der Endlagersuche für hochradioaktive und wärmeentwickelnde Abfälle (siehe Standortauswahlgesetz /STA 17/) stehen nun auch Tonstein und Kristallin im Fokus.

Allgemeines Ziel der Recherche in diesem Bericht ist es, zunächst ein grundlegendes Verständnis zu erlangen, welche Prozesse die Integrität von Tonstein beeinflussen können, um darauf aufbauend geeignete Material/Stoffmodelle aufzuzeigen, mit denen die mechanischen Eigenschaften von Tonstein numerisch simuliert werden können. Hierzu werden zudem Hinweise für Tonsteinformationen in Deutschland und vergleichbare Formationen im internationalen Vergleich aufgezeigt, damit Materialdaten aus anderen Ländern zur Parametrisierung von vorläufigen Materialmodellen verwendet werden können.

Die Arbeiten im vorliegenden Bericht beziehen sich auf das integritätsrelevante Materialverhalten von Tonstein. Entsprechend der Aufgabenstellung im Arbeitspaket 1.1 (Integritätsnachweis Ton/Tonstein), werden folgende Fragestellungen bearbeitet:

- Erhebung des Sachstands aus endlagerrelevanter Sicht, insbesondere mit Bezug auf das gebirgsmechanische Verhalten, von Ton und Tonstein in-situ und im Labor.
- Erhebung des Sachstands der Stoffgesetze, welche das endlagerrelevante bzw. gebirgsmechanische Verhalten von Ton und Tonstein beschreiben können.

Im Kapitel 2 wird eine Sachstandserhebung für das Prozessverhalten von Ton/Tonstein aus endlagerrelevanter Sicht gegeben. Hierbei wird ein Überblick über die Prozesse gegeben, welche im Ton/Tonstein die Integrität bzw. die abdichtenden Eigenschaften insbesondere für den Fluidtransport beeinflussen. Dies können mechanische oder hydraulische Prozesse sein, welche durch thermische oder chemische Prozesse beeinflusst werden können.

Die Integrität bzw. das Einschlussvermögen eines Endlagerkonzeptes wird in der Regel durch numerische Modellierungen überprüft, in denen das Endlagermodell mit dem entsprechenden Endlager- und Barrierenkonzept abgebildet ist. Insbesondere das mechanische Materialverhalten muss durch Rechenmodelle berücksichtigt werden, da ein mechanisches Materialversagen zu hydraulischen Wegsamkeiten und somit zu einem beschleunigten Stofftransport führen kann. Eine weitere Fragestellung bezieht sich deshalb auf die Sichtung von Stoffmodellen, mit denen die mechanische Integrität von Tonstein numerisch überprüft werden kann.

Im Kapitel 3 wird zunächst beschrieben, welche hydraulisch-mechanischen Prozesse in einem Materialmodell für Tonstein berücksichtigt werden sollten/können. Dies leitet über zur Beschreibung von Materialmodellen, welche das gebirgsmechanische und endlagerrelevante Verhalten von Ton und Tonstein beschreiben.

Zur Durchführung von numerischen Integritätsanalysen werden gebirgsmechanische Daten benötigt. Die erfolgte Forschung an deutschen Forschungseinrichtungen wurde hauptsächlich an Tonsteinen aus ausländischen Untertagelaboren durchgeführt. Die allgemeine Datenlage zu gebirgsmechanischen Materialeigenschaften für Tonformationen in endlagerrelevanter Tiefe in Deutschland ist deshalb mangelhaft. Für vorläufige (generische) Untersuchungen können Daten aus ähnlichen Gesteinsformationen aus anderen Ländern herangezogen werden. Das Kapitel 1.2 gibt hierzu eine Übersicht.

In Deutschland ist der Integritätsnachweis regulatorisch durch die Sicherheitsanforderungen für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle des BMU (Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit) /BMU 10/ geregelt. Das Kapitel 1.1 gibt hierzu eine kleine Einführung, auch im internationalen Vergleich.

1.1 Integritätsnachweis im Tonstein

In Deutschland formulieren die Sicherheitsanforderungen des BMU /BMU 10/, regulatorische Anforderungen an den Nachweis der Integrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereiches, im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises. Diese Anforderungen sind konkreter als in anderen Ländern. Nach /WEY 16/ werden in Frankreich für die Entsorgung von radioaktiven Abfällen keine grundlegenden Anforderungen an eine Integritätsanalyse festgelegt. In der Endlagerrichtlinie der Autorité de Sûreté Nucléaire (ASN) werden lediglich geologische Standortanforderungen genannt, aus denen integritätsgefährdende Zustände und Prozesse abgeleitet werden können. Auch in der Schweiz werden keine grundlegenden Anforderungen an eine Integritätsanalyse gestellt. In Finnland und Schweden wird der Integritätsbegriff hauptsächlich auf die Behälter angewandt, da diese die wesentliche Barriere darstellen. Die Fokussierung auf die Endlagerbehälter als Hauptbarriere liegt daran, dass das Endlager im Wirtsgestein Kristallin erstellt wird und die hydraulische Durchlässigkeit von Kristallin sehr heterogen sein kann. Das Endlagerkonzept beruht auf so genannten Sicherheitsfunktionen. Die Sicherstellung bestimmter günstiger (z. B. abdichtender, stützender) Eigenschaften von Endlagerkomponenten, wird durch ein oder mehrere Sicherheitsfunktionen gewährleistet.

Im Zuge der Erstellung der Sicherheitsanforderungen von 2009 /BMU 09/ erhielt der Integritätsnachweis eine zentrale Rolle im Nachweisverfahren für den Langzeitsicherheitsnachweis wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in Deutschland. Die aktuellen Sicherheitsanforderungen von 2010 /BMU 10/ fordern eine "Langzeitaussage zur Integrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs". Detaillierte Arbeiten zur Anwendung der in den Sicherheitsanforderungen beschriebenen Integritätskriterien auf Tonstein wurden in einem eigenständigen Bericht /NAV 19/ in diesem Vorhaben dokumentiert. Für weiterführende Informationen wird auf diesen Bericht verwiesen.

1.2 Tonsteinformationen in Deutschland

In Deutschland wurden untersuchungswürdige Tonsteinformationen in endlagerrelevanter Tiefe (nach AkEnd /AKE 02/ muss die Teufe des ewG¹ größer als 300 m sein) zunächst vom Bundesamt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) identifiziert. In der so genannten Tonstudie /HOT 07/ wurden nach dem damaligen Kenntnis- und Verfahrensstand (zeitlich deutlich vor Beschluss des StandAG) Teilgebiete mit untersu-

¹ Nach /BMU 10/ ist der einschlusswirksame Gebirgsbereich (ewG) folgendermaßen definiert:

[&]quot;Der einschlusswirksame Gebirgsbereich ist der Teil des Endlagersystems, der im Zusammenwirken mit den technischen Verschlüssen (Schachtverschlüsse, Kammerabschlussbauwerke, Dammbauwerke, Versatz, ...) den Einschluss der Abfälle sicherstellt."

chungswürdigen Tongesteinen als potenzielle Endlagerwirtsgesteinsformationen in Deutschland identifiziert. Als Grundlage der Untersuchungen dienten die im Jahr 2002 vom Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte (AkEnd) /AKE 02/ aufgestellten wirtsgesteinsunabhängigen Ausschlusskriterien und Mindestanforderungen. Sie wurden ergänzt durch wirtsgesteinsabhängige Auswahlkriterien für Tongesteine. Zusätzlich wurden weitere Kriterien zur regionalen Einschränkung von Tongesteinsformationen in Deutschland herangezogen (siehe /HOT 07/). Im Sinne einer neuen Standortsuche bzw. einer weißen Landkarte sind die erfolgten Untersuchungen zu untersuchungswürdigen Tonsteinformationen verfahrenstechnisch jedoch zunächst obsolet.

Im ERATO-Vorhaben /PÖH 10/ wurden, basierend auf den F&E-Vorhaben GEIST /AME 04/ und GENESIS /AME 07/, Grundlagen für eine Endlagerauslegung im Tonstein erarbeitet und Referenzendlagerkonzepte in generischen (nicht standortbezogenen) Endlagern für zwei unterschiedliche Regionen geplant. Die Regionen bzw. Tonstein-Formationen, wurden basierend auf verschiedenen geowissenschaftlichen Ausschlusskriterien und Mindestanforderungen ausgewählt (siehe auch /HOT 07/, /AKE 02/).

Die Arbeiten aus dem ERATO-Vorhaben /PÖH 10/ wurden wiederum als Grundlage des AnSichT-Vorhabens /JOB 17/ verwendet. In diesem Vorhaben wurden Endlagerkonzepte für zwei Referenz-Endlagerkonzepte im Tonstein für Deutschland erstellt, in denen grundsätzlich nach zwei Endlagerstandortmodellen Nord und Süd unterschieden wird. Die Ergebnisse dieses Vorhabens können als Stand von Wissenschaft und Technik zur Erstellung eines Endlagerkonzeptes in Tonstein in Deutschland angesehen werden. Unter anderem wurden im AnSichT-Vorhaben von /JAH 16/ geowissenschaftliche Daten des Opalinustons in Süddeutschland (siehe Kap. 1.3) zusammengestellt.

In /BUR 16/ wurden zudem im Rahmen des AnSichT-Vorhabens generische Prozessanalysen durchgeführt. Die numerischen Rechnungen sollten das Prozessverständnis für bestimmte Sachverhalte (z. B. den endlagerrelevanten Fluidtransport) verbessern. Die Ergebnisse der Prozessanalysen fanden unter anderem Eingang in die Entwicklung der Endlagerkonzepte.

1.3 Tonsteinformationen im internationalen Vergleich

Im Folgenden werden Tonsteinformationen aus anderen Ländern beschrieben, um eine mögliche Übertragung von Materialdaten zur Erstellung von Materialmodellen für vorläufige (generische) numerische Modellrechnungen zu prüfen.

Tonsteine werden insbesondere in der Schweiz, Belgien und in Frankreich zur Endlagerung radioaktiver Abfälle untersucht. In Belgien ist dies der so genannte Boom-Clay. In der Schweiz und in Frankreich werden diagenetisch verfestigte Tonsteine, wie der Opalinuston (Schweiz) und die Tonsteine der Callovo-Oxfordian-Formation (Frankreich) zur Endlagerung in Betracht gezogen.

Der Opalinuston in der Schweiz wurde in mehreren Bohrungen und insbesondere im Untertagelabor Mont-Terri aufgeschlossen. Nach /MAR 14/ ist der Opalinuston in der Schweiz deutlich geschichtet, dies zeigt sich in einer ausgeprägten Anisotropie von Festigkeit und Steifigkeit. Zudem wird das Deformationsverhalten durch gekoppelte hydro-mechanische Prozesse aufgrund der geringen Zugfestigkeit und der Quellfähigkeit des Opalinustons beeinflusst.

In Frankreich /AND 05a/ ist ebenfalls eine Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonstein geplant. Das Endlagerkonzept sieht eine Einlagerung in der Callovo-Oxfordian-Formation (COx-Formation) in einer Tiefe von ca. 500 m vor. Die Tonsteine des COx werden zurzeit in dem Untertagelabor Meuse/Haute-Marne bei Bure untersucht.

Die COx-Formation kann anhand der mineralogischen Zusammensetzung und Sedimentationshistorie in drei unterschiedliche Sequenzen unterteilt werden. Nach /AND 05a/ wird in eine untere, mittlere und obere Sequenz unterteilt. Das Untertagelabor wurde in der mittleren Sequenz aufgefahren. Die Porosität der Gesteine liegt zwischen 10 % und 18 %. In /AND 05b/ wird eine totale Porosität von 18 % angegeben. Die Sedimentation hat eine Schichtung des Materials bewirkt. Dies führt, wie auch im Opalinuston, zu einer Anisotropie der Gesteinseigenschaften.

Die COx-Tonsteine sind mineralogisch dem Opalinuston der Schweiz sehr ähnlich. Dies zeigt sich auch in Bezug auf die Plastizitätseigenschaften und der Festigkeit. Der Opalinuston ist etwas älter (180 Mio. Jahre) als die untersuchte COx-Formation (155 Mio. Jahre), dennoch gibt es ähnliche Merkmale. Der Opalinuston hat eine ähnliche mineralogische Zusammensetzung (Ton, Quarz und Carbonate) wie die mittlere Sequenz des COx, obwohl der Karbonatgehalt etwas geringer ist. Wie der COx-Ton ist der Opalinuston ein reduzierendes Medium mit geringer Permeabilität und geringer Porengröße. Die Transporteigenschaften beider Tonsteine sind ähnlich (Diffusion überwiegt) ebenso wie ihre mechanischen Eigenschaften. Ein wesentlicher Unterschied besteht in der maximalen Versenkungstiefe der untersuchten Gesteine. In der Schweiz wurden die Gesteine ca. doppelt so tief versenkt wie in Frankreich und zudem von der alpinen Tektonik beeinflusst. Aufgrund der geringeren Versenkungstiefe weisen die Gesteine im Untertagelabor bei Bure eine höhere Porosität auf /MAR 14/.

Der Anteil an quellenden Tonmineralen, insbesondere des Smektits, beträgt im COx-Tonstein 13 - 23 % und im Opalinuston 5 - 20 %. Trotzdem quillt der Opalinuston etwas stärker als der COx-Tonstein, da der allgemeine Tongehalt höher ist /ZHA 17a/.

Aufgrund der ähnlichen Materialeigenschaften der beiden Gesteine wurden von der ANDRA (Frankreich) zur Verifikation ihrer Materialmodelle zusätzliche Parameter des Opalinustons des Untertagelabors in Mont Terri verwendet /AND 05a/. Es war daher möglich, die für Opalinuston entwickelten Materialmodelle auf den COx-Tonstein zu übertragen.

Der in Belgien untersuchte Boom-Clay ist sehr plastisch und von unterscheidet sich in seinen mechanischen Eigenschaften sehr vom Opalinuston und den COx-Tonen. Deshalb konzentriert sich die hier vorgestellte Recherche auf die Eigenschaften und Parameter des COx-Tonsteins und Opalinustons. Die Tab. 1.1 veranschaulicht nochmal die unterschiedlichen Eigenschaften zwischen Opalinuston und dem Boom-Clay.

Parameter	Materialeigenschaften
E-Modul	Boom-Clay, Belgien: 0,2 – 0,4 GPa Opalinuston, Schweiz: 4 – 12 GPa
Einaxiale Druckfes- tigkeit	Boom-Clay, Belgien: 2 MPa Opalinuston, Schweiz: 10 – 16 GPa
Kohäsion	Boom-Clay, Belgien: 100 kPa Opalinuston, Schweiz: 2,2 – 5,5 MPa (Abhängigkeit von σ_1)
Kriechverhalten	(Visko-)elasto-plastische Stoffgesetze
Wärmeleitfähigkeit	Boom-Clay, Belgien: ca. 1,5 W/mK Opalinuston, Schweiz: ca. 0,8 – 1,9 W/mK

Tab. 1.1Vergleich des Wertebereiches wichtiger Materialparameter (nach
/KUD 13/)

Für die Erstellung des generischen Endlagerkonzeptes im Vorhaben AnSichT /JAH 16/, wurde wegen der schlechten Datenlage überwiegend Daten verwendet, die aus Standorterkundungsprogrammen in Frankreich und insbesondere der Schweiz erhoben wurden. Generell sind nicht alle in der Schweiz gewonnenen Daten auf die Modellregion Süd übertragbar. Deshalb wurden in /JAH 16/ vor allem Daten verwendet, die sich auf homogenere Tonsteinbereiche beziehen. Dabei wurden vor allem Daten aus der Bohrung Benken in der Nordschweiz und dem Felslabor Mont-Terri verwendet.

Mögliche Unterschiede zwischen den Gesteinseigenschaften der Tonsteine der Schweiz und in Süddeutschland können nach /JAH 16/ aufgrund der hohen mineralogischen Variabilität in vertikaler und lateraler Richtung entstehen. Genaue Kenntnisse über die Gesteinseigenschaften würden nur durch eine Erkundung in der Modellregion erlangt werden.

2 Materialeigenschaften und Prozessentwicklung während der Betriebs-, Übergangs- und Langzeitphase im Tonstein

Im folgenden Kapitel werden die Prozesse beschrieben, welche im Ton/Tonstein aus integritätsrelevanter Sicht ablaufen. Dies können geomechanische oder hydraulische Prozesse sein, welche durch thermische oder chemische Prozesse beeinflusst werden können. Im Anhang B sind beispielhaft Materialkennwerte sowie deren Literaturhinweise aufgeführt.

2.1 Einführung

Tone und Tonsteine werden aufgrund ihrer günstigen hydraulisch-isolierenden und retardierenden Eigenschaften in Bezug auf den Radionuklidtransport, als Wirtsgesteine (Tonstein) und geotechnische Abdichtmaterialien (Ton bzw. Bentonit) zur Endlagerung radioaktiver Abfälle, in Betracht gezogen.

Unter anderem gibt Navarro /NAV 05/ eine gute Übersicht welche integritätsbeeinflussenden Prozesse unter Endlagerbedingungen zu berücksichtigen sind. /NAV 05/ beschreibt die Prozesse, welche die Barrierenintegrität während der normalen Entwicklung (keine Störfälle) eines Endlagers beeinflussen können. Zudem wird eine Charakterisierung und Bewertung der Barriereneigenschaften toniger Wirtsgesteine durchgeführt.

Im Folgenden sind wesentliche Eigenschaften aufgeführt, welche Ton/Tonsteine charakterisieren:

- Sehr geringe hydraulische Durchlässigkeit (Filterung von Kolloiden), geringe Anionendiffusionskapazität und eine geringe Transportkapazität für positiv geladene Radionuklidspezies.
- Hohes Quellungspotential (insbesondere Bentonit) und ein duktiles Materialverhalten (abhängig vom Wassergehalt), wodurch ein Verheilen von hydraulischen Wegsamkeiten stattfindet.
- Hohes Sorptionspotential, insbesondere von positiv geladenen Radionuklidspezies an den negativ geladenen Tonmineraloberflächen.
- Günstige Wärmeleiteigenschaften.

Die Struktur der Tonminerale ist entscheidend für das Verständnis der Quellfähigkeit und der Kationenaustauschkapazität bzw. dem Adsorptionsvermögen. Die Wirtsgesteine Opalinuston, sowie die Tonsteine der COx-Formation bestehen aus verschiedenen Mineralen (siehe Kap. 1.3), welche die Eigenschaften bzw. die Struktur der Gesteine charakterisieren. Hauptgemengteile (> 10 %) der Tonsteine sind unter anderem so genannte Dreischicht-Tonminerale, welche die oben genannten Gesteinseigenschaften signifikant beeinflussen. Ein grundlegendes Verständnis der physikalisch-chemischen Eigenschaften dieser Materialien ist deshalb wichtig zum Verständnis des Materialverhaltens.

Tonminerale bestehen im Wesentlichen aus unterschiedlichen Wechselfolgen von zwei verschieden strukturierten Schichten /BEH 07/:

- Die erste Schicht besteht aus SiO₄-Tetraedern.
- Die zweite Schicht setzt sich aus Al(OH)₆-Oktaedern zusammen.

Aus der Art der Verknüpfung der Tetraederschichten mit den Oktaederschichten sowie der Substitution von Si durch AI in der Tetraederschicht sowie AI durch Mg in der Oktaederschicht, lässt sich eine Vielzahl von verschiedenen Tonmineralarten ableiten. Tetraeder- und Oktaederschichten bilden stets eine feste chemische Verbindung. Die Schichtpakete sind durch die Substitution nach außen hin nicht elektrisch neutral. Sie binden sich gegenseitig über elektrostatische Kräfte. Tonminerale werden nach ihrem strukturellen Aufbau in der Regel in Zweischicht- oder Dreischicht-Tonminerale unterteilt /KAT 13a/.

Die Abb. 2.1 zeigt den strukturellen Aufbau eines Dreischicht-Tonminerals. Hier besteht eine Schicht aus einer Oktaederschicht (O), welche von zwei Tetraederschichten (T) eingeschlossen wird.



Dreischicht-Tonmineral (2:1 Schichtsilikat) z.B. Smectit, Illit oder Vermiculit



Tonminerale können aufgrund ihrer negativen Oberflächenladung zwischen den Mineralschichten Wassermoleküle (Dipol) oder Kationen binden. Durch die reversible Einlagerung von H₂O in Zwischenschichten können Tone quellen oder schrumpfen. Kationen können gegen andere Kationen ausgetauscht werden (Kationenaustauschkapazität) /BEH 07/.

Für Tonstein müssen komplexere Materialmodelle (siehe Kap. 3) als z. B. für Salzgestein entwickelt werden, da der Wassergehalt das THMC-Verhalten der Tonsteine signifikant beeinflusst. Das Porenwasser in Tonen bzw. Tonsteinen, kann physikalisch oder chemisch gebunden sein und damit nicht am advektiven Transport teilnehmen. Nach /BÖN 04/ werden fünf unterschiedliche Bindungstypen unterschieden. Je nach Bindungsart kann das Wasser unterschiedlich stark gebunden sein.

- Oberflächenhaftwasser, unter dem eine diffuse Doppelschicht an der Oberfläche eines Kornaggregats verstanden wird. Die Menge des so gebundenen Wassers ist vom Koagulationsgrad und damit von der frei zugänglichen Oberfläche abhängig.
- 2. Sorptionswasser, welches an der Oberfläche des Tonminerals (Kristall) durch eine chemische Bindung reversibel adsorbiert wird,
- 3. Zwischenschichtwasser, dass in den Zwischenschichten von quellfähigen Tonen eingelagert werden kann,

- 4. Hydratwasser, welches als Molekül am Aufbau des Kristallgitters der Tonminerale beteiligt ist und
- 5. Hydroxylwasser, welches als Anion in Kristallgitter von Tonmineralen eingebaut ist.

2.2 Prozessentwicklung

Grundsätzlich muss im Rahmen der Prozessbetrachtung zwischen zwei Arten "Ton/Tonstein" in Bezug auf ihren Einsatzzweck unterschieden werden:

- 1. das anstehende Wirtsgestein (mit der Auflockerungszone) in dem das Endlagerbergwerk aufgefahren wird und
- die geotechnischen Materialien, wie die Damm- und Verschlussbauwerke (z. B. Bentonit), hierzu wird auch der Streckenversatz gezählt.

Beide Komponenten beeinflussen sich gegenseitig im Zusammenspiel mit dem Streckenausbau (Stahlnetz und/oder Beton). Im Allgemeinen beeinflussen die folgenden Prozesse die initialen Eigenschaften bzw. die Entwicklung der Komponenten /RUT 15/:

- Der Temperatureintrag bzw. die maximale Temperatur durch die eingelagerten Abfall-Behälter/Gebinde.
- Initiale Wassergehalte und der zeitliche Verlauf der Aufsättigung mit Flüssigkeit.
- Spannungsverhältnis² und das mechanische Verhalten des Gesteins (hierzu gehören auch Prozesse die das Spannungsverhältnis beeinflussen, wie das Quellen des Tonsteins oder die Erhöhung des Porendruckes durch Konvergenz und Gasbildung)

² Das Spannungsverhältnis bzw. der Spannungszustand im Untergrund ist isotrop, wenn alle Kräfte im Gleichgewicht stehen. In der Regel wirken jedoch unterschiedliche Kräfte (Spannungen) in den drei Raumrichtungen. Der Spannungszustand an einem Punkt im Kontinuum, kann durch einen Spannungstensor (CAUCHYschen Spannungstensor) beschrieben werden. Der Spannungstensor ist durch die Spannungsvektoren in drei beliebigen, aufeinander senkrecht stehenden Schnitten festgelegt /KAT 13b/.

Für die ablaufenden Prozesse müssen zwei Phasen des Endlagers berücksichtigt werden:

- die Betriebsphase mit einem offen stehenden und aktiv bewetterten Grubengebäude sowie
- die Nachbetriebs- und Langzeitphase in der das Grubengebäude mit Versatz gefüllt wurde, ein Wärmeeintrag aus den Abfallgebinden erfolgt und eine aktive Aufsättigung mit Flüssigkeit stattfindet.

Im Folgenden werden THM(C)-Prozesse beschrieben, die während der Betriebsphase und der anschließenden Nachbetriebs- und Langzeitphase eines Endlagers die Entwicklung der unterschiedlichen Ton-Komponenten beeinflussen. Danach werden allgemeine hydraulische und petro-physikalische Eigenschaften für Tonsteine erläutert.

2.2.1 Betriebsphase

Das Auffahren des Grubengebäudes führt zu einer Änderung des Spannungszustandes im Nahfeld des Endlagers und zu einer Änderung des Porendruckes entlang der Kontur der aufgefahrenen Hohlräume. Es zeigt sich ein scharfer Gradient des Porendrucks und eine hohe deviatorische³ Spannung in der Nähe der Hohlräume, nach Entlastung der radialen (senkrecht zur Streckenachse) Spannungskomponente. Dies führt zu einer Auflockerung (Mikro- und Makrofrakturen) im umgebenden Wirtsgestein /ZHA 13/.

Nach /ZHA 13/ kann eine bergbaubedingte Auflockerung der Hohlraumkontur in zwei Zonen unterteilt werden: die Auflockerungszone (EDZ – Excavation Disturbed Zone) und die gestörte Zone (EdZ) (Abb. 2.2). Die hydraulische Leitfähigkeit der EDZ kann um mehrere Größenordnungen bis zu dem Punkt ansteigen, an dem die Barrierefunktion des Wirtsgesteins in Bezug auf die Radionuklidmigration nicht mehr gegeben ist. Die EdZ, welche sich außerhalb der EDZ anschließt, ist weniger mechanisch geschädigt und weist keine signifikanten Änderungen der Durchfluss- und Transporteigenschaften auf, im Bezug zum ungestörten Wirtsgestein.

³ Materialverformung steht gewöhnlich im Zusammenhang mit einer Abweichung des Spannungszustandes vom isotropen Zustand. Die deviatorische Spannung (deviatoric stress) drückt einfach gesagt diese Abweichung aus, indem die Mittelspannung vom allgemeinen Spannungstensor subtrahiert wird /BUR 18/.

Die Konvergenz (Hohlraumreduzierung) der Hohlräume sowie die Schädigungsintensität und -ausdehnung der EDZ/EdZ hängt hauptsächlich von den mechanischen Eigenschaften des Gesteins, der angewandten Aushubtechnik, der Größe des Hohlraumes und der Geometrie, sowie von Stützungsmaßnahmen (Spritzbeton, Anker, Stahlbögen usw.) ab. Die Hohlräume in tiefen Tonformationen müssen in der Regel gestützt (Streckenausbau) werden, um Standsicherheit zu gewährleisten und die EDZ-Ausbreitung zu begrenzen. Darüber hinaus haben die anisotropen Eigenschaften der sedimentären Tonsteine und der anisotrope Spannungszustand auch einen Einfluss auf die Entwicklung der EDZ/EdZ. Risse und Klüfte bilden sich bevorzugt parallel zur Schichtung /ZHA 13/.

In der Betriebsphase führt die relativ niedrige Feuchtigkeit der Wetter (Grubenbelüftung) zur Entsättigung des Gesteins entlang der Hohlraumkonturen mit Flüssigkeit. Die entsättigte Zone bleibt im Wesentlichen auf die aufgelockerte Zone (EDZ) mit vernetzten Rissen beschränkt, weil hier die Permeabilität am größten ist /AND 05a/. Die Entsättigung führt zudem zu höheren Kapillarkräften (Saugspannung) und damit zu einer Zunahme der Festigkeit aufgrund der Kohäsion und Verkittung des Gesteinsgefüges (schrumpfen). Gleichzeitig führt die Entsättigung zu einem Zusammenbruch der Porenstruktur und es entstehen Mikrorisse, die sich vorwiegend auf Schichtebene ausbreiten. Nach /AND 05a/ wirkt sich dieser Prozess auf einen Bereich aus, der wenige Dezimeter um die aufgefahrenen Hohlräume begrenzt ist. Dies erhöht aber nicht die Ausdehnung der initialen Auflockerungszone. Als drucktragendes Element bewirkt die Freisetzung von gebundenem Porenwasser auch eine Änderung des Spannungszustandes im Gestein. Zudem wird während der Betriebsphase durch die Bewetterung des Endlagerbergwerkes das geochemische Milieu verändert. Durch den Eintrag von Sauerstoff wird z. B. Pyrit oxidiert.

Nach dem Einbringen der Endlagerbehälter und dem Versatz der Einlagerungsstrecken führt die Erwärmung im Versatz und im Wirtsgestein zu komplexen THMC-Prozessen (Abb. 2.2). Die Erwärmung beschleunigt die rheologische Verformung des Gesteins in die Hohlräume bzw. führt zu einer Verringerung des Porenhohlraumes (Konvergenz). Bei Hohlräumen, die durch einen Ausbau gestützt werden, kann sich ein hoher Druck auf den Ausbau aufbauen /ZHA 13/.

Der Wärmeeintrag durch die Endlagergebinde führt zu einer vorübergehenden Erhöhung des Porenwasserdruckes im gesättigten Nahfeld (thermal pressurization), wodurch die lokale effektive mittlere Spannung verringert wird. Dieser Prozess ist im

14

Wesentlichen abhängig von der Durchlässigkeit des Tonsteins, bzw. wie schnell sich der Porendruck wieder ausgleichen kann. Im Extremfall, wenn die lokale minimale Hauptspannung überschritten wird, können sich Risse im Gestein bilden /ZHA 13/.

In einem homogenen Spannungsfeld existieren immer drei gemeinsame orthogonale Ebenen, welche einen gemeinsamen Schnittpunkt haben. Die Ebenen sind so orientiert, dass die Scherspannungen Null werden. Diese drei Ebenen werden Hauptspannungsebenen (principal planes of stress) genannt und sie schneiden sich entlang drei zueinander senkrechten stehenden Linien, den sog. Hauptspannungsachsen (principal axes of stress) eines betrachteten Punkts. Die Spannungskomponenten, die in Richtung dieser drei Achsen wirken, sind die Hauptspannungen (principal stresses). Sie werden je nach Betrag in eine maximale, intermediäre und minimale Hauptspannung unterteilt /BUR 18/.

Zusätzlich kann der thermische Eintrag auch die Eigenschaften des Versatzes und des Wirtsgesteins beeinflussen, wie z. B. die Umwandlung bzw. Alterierung von Tonmineralien, die Veränderung der Quelleigenschaften, die thermisch induzierte Konsolidierung und damit die Erhöhung der Steifigkeit und Festigkeit. Trotz dieser Effekte müssen die Barrierefunktionen der natürlichen und technischen Barrieren erhalten bleiben. In der Abb. 2.2 sind die oben beschriebenen THM-Prozesse im Nahfeld eines Einlagerungsbohrloches schematisch dargestellt /ZHA 13/.



Abb. 2.2 Gekoppelte THM-Prozesse im Nahfeld eines Einlagerungsbohrloches, vor (links) und nach (rechts) der Einlagerung eines Endlagerbehälters /ZHA 13/

2.2.2 Nachverschlussphase

Nach Verschluss des Endlagers wird sich der Streckenausbau langsam zersetzen und seine stützenden Eigenschaften verlieren. Dadurch wird die Kompaktion der Versatzmaterialien im Endlagerbergwerk begünstigt. Thermisch beschleunigte Gesteinsumwandlungen und die Porenwassermigration im Nahfeld der Behälter können die Kompaktion der EDZ/EdZ und des Ton-Versatzes (zur Verfüllung von Hohlräumen) verstärken /ZHA 13/.

Nach /BUR 16/ weist der Ton-Versatz nur eine geringe initiale Flüssigkeitssättigung auf. Dies induziert einen hohen (Kapillar)-Druckgradienten zwischen dem Hohlraum (Porenraum + nicht versetzte Hohlräume) im Endlagerbergwerk und dem gesättigten Wirtsgestein. Dies führt zu einem Aufsättigungsprozess durch Flüssigkeitsmigration zwischen dem Wirtsgestein und den versetzten Hohlräumen im Grubengebäude sowie der EDZ/EdZ.

Mit zunehmendem Wassergehalt neigen Tonminerale dazu zu quellen. Durch die Ausdehnung des Materials bei einer gleichzeitigen Einspannung im Grubengebäude (wird durch Beton-Widerlager gewährleistet), werden bereits vorhandene Risse in der EDZ geschlossen und die Porosität im Versatz verringert. Der Quelldruck entwickelt sich in Abhängigkeit von der Menge an quellfähigen Tonmineralien, der Flüssigkeitssättigung und Dichte bzw. Porosität. Darüber hinaus führt die Aufsättigung auch zu einer Reduzierung der Festigkeit des Tonsteins und beschleunigt den Kriechprozess bei der Kompaktion /ZHA 13/.

Der Aufsättigungsprozess des Versatzes bzw. wie gut Flüssigkeit zum Versatz migrieren kann, hängt in der frühen Nachverschlussphase insbesondere von der Art und der Mächtigkeit des Streckenausbaus ab. Wenn ein Ausbau der Einlagerungsstrecken mit Spritzbeton erfolgt, wird der Flüssigkeitsfluss stärker gehemmt, im Gegensatz zu einem Ausbau mit einem Stahlnetz. Die Alteration von Materialien, wie z. B. des Streckenausbaus, kann eine potentielle "geochemische Schadenszone (GDZ)" im Nahbereich erzeugen. Durch die Alteration von Zement des Streckenausbaus wird der pH-Wert der Lösung im umgebenden Tonstein erhöht. Dies kann zur Auflösung von Quarz- und Tonmineralien und die Ausfällung von Calcit und anderer Mineralien wie Zeolith führen, was Auswirkungen z. B. auf die Sorptionseigenschaften haben kann. Allerdings ist das Massenverhältnis zwischen den Mineralen des Wirtsgesteins und den technischen Materialien so hoch, dass die chemischen Störungen, die durch die eingebrachten Materialien verursacht werden, in der Ausdehnung auf wenige Dezimeter begrenzt sind /AND 05a/.

Die anaerobe Korrosion, insbesondere der metallischen Komponenten im Grubengebäude und der Endlagerbehälter produziert Gas, welches vorzugsweise durch den porösen Versatz, die EDZ bzw. den Streckenausbau und deren Zwischenräume fließen kann. Die Gasmigration kann durch Advektion, Diffusion von gelöstem Gas, Zweiphasenströmung und Strömung in makroskopischen Klüften gesteuert werden /ZHA 13/.

Es sollte in numerischen Modellen von Endlagerkonzepten die Gasproduktion und die Migration überprüft werden, damit die Integrität des Mehrbarrierensystems nicht beeinträchtigt wird (siehe Fluiddruckkriterium /BMU 10/). Zudem ist nicht auszuschließen, dass das erzeugte Gas, wenn dieses nicht aus dem Porenraum abgeleitet werden kann, den Aufsättigungsprozess verlangsamt, bzw. bereits gesättigte Poren wieder entsättigt (Gaseindringdruck). Die Gasbildung kann den Porendruck und somit das Spannungsverhältnis beeinflussen. Im Extremfall, wenn das Fluiddruckkriterium verletzt wird, können sich Risse im Gestein bilden /ZHA 13/.

2.3 Beschreibung der Prozesse und Eigenschaften

Im Folgenden werden Prozesse, welche den Radionuklidtransport beeinflussen können, näher beschrieben. Die Prozesse gelten für geotechnische Materialien und das Wirtsgestein gleichermaßen. Nach /JAH 16/ werden folgende Faktoren zur Beeinflussung der Gesteinseigenschaften von Tonstein zusammengefasst:

- Aufgrund der Sedimentation von Tonen und der resultierenden mineralogischen Schichtung, können Tonsteine anisotrope Gesteinseigenschaften aufweisen.
- Der Tonmineralgehalt, vor allem der Anteil an sorptions- und quellfähigen Tonmineralen, beeinflusst die Sorptionskapazität, die Quellfähigkeit, das mechanische Verhalten und die diffusiven Transporteigenschaften des Gesteins.
- Karbonatminerale beeinflussen den pH-Wert des Porenwassers und beeinflussen die mechanische Festigkeit des Gesteins.
- Die Porenwasserchemie kann durch Minerale wie Pyrit, Siderit sowie organische Bestandteile beeinflusst werden.

 Die hydraulischen und mechanischen Eigenschaften sind insbesondere von der Flüssigkeitssättigung und der Korngrößenverteilung abhängig.

2.3.1 Fluidströmung (advektiver Transport)

Für den Fluidtransport muss unterschieden werden, ob er im Porenraum und/oder in nicht verfüllten Hohlräumen, wie einem potentiellen Streckenfirst stattfindet. Zur numerischen Berechnung der Fluidströmung gelten zwei unterschiedliche numerische Ansätze. Zudem überwiegt im Porenraum (je nach hydraulischer Durchlässigkeit) der diffusive Transport, im Gegensatz zum advektiven Transport nicht verfüllten Hohlräumen. Grundsätzlich wird in den folgenden Beschreibungen vom Fluidtransport im Porenraum ausgegangen. Dies schließt aufgelockerte Gebirgsbereiche (EDZ) mit ein.

Nach Verschluss des Endlagers ist eine Saumzone im Wirtsgestein um die Grubenhohlräume herum aufgrund der Bewetterung in Bezug zum restlichen Wirtsgestein mit Flüssigkeit entsättigt. Zudem sind die initialen Wassergehalte der geotechnischen Materialien im Endlagerbergwerk relativ gering. In der Nachbetriebsphase findet zunächst ein Aufsättigungsprozess mit Flüssigkeit aus dem umgebenden Wirtsgestein statt. Der zeitliche Verlauf des Aufsättigungsprozesses von entsättigten Geomaterialien aber auch der Auflockerungszone, wird von verschiedenen Faktoren beeinflusst /ZHA 13/:

- Porendruckgradient zwischen den geotechnischen Materialien und dem anstehenden Wirtsgestein,
- Saugspannung (abhängig vom Tongehalt, Salinität der Lösung und der initialen Flüssigkeitssättigung),
- Hydraulische Durchlässigkeit (Permeabilität) der Materialien,
- Zeitlicher Verlauf der Gasbildung,
- Temperaturgradient.

Die wichtigste Antriebskraft für die Aufsättigung von geotechnischen Materialien (z. B. Streckenversatz) und der entsättigten Saumzone im Wirtsgestein, ist ein Porendruckgradient, welcher zu einer Flüssigkeitsmigration aus dem umliegenden Wirtsgestein führt /SKB 10/. Der Porendruckgradient wird insbesondere von der Saugspannung beeinflusst. Die Saugspannung setzt sich aus dem Kapillardruck und dem osmotischen Druck (abhängig von der Mineralisation der Porenlösung) zusammen. Der Kapillardruck ist insbesondere vom Sättigungsgrad des Porenraumes und der Porengrößenverteilung abhängig.

In /ROT 12/ wurden Proben aus Sand/Bentonit-Mischungen erstellt und die zeitliche Aufsättigung mit Flüssigkeit im Labor untersucht. Es zeigte sich eine hohe Diskrepanz zwischen der vorhergesagten und der beobachteten Sättigungszeit. Gründe hierfür könnten ein falsches Prozessverständnis oder eine Unsicherheit der Parameterwerte, die in den Berechnungen verwendet wurden, sein. Dies zeigt die Komplexität des Prozesses und die hohen Anforderungen an die Messung der Parameterwerte sowie an das Prozessverständnis.

Bei mehrphasigen Systemen (Gas und Flüssig) ist die Beeinflussung der hydraulischen Durchlässigkeit durch die Wechselwirkung der Phasen untereinander von besonderem Interesse. Es können Phasenwechsel durch Evaporation, Kondensation, Lösung und eine thermische Verdampfung der Fluide auftreten.

Die Wechselwirkung der beiden Phasen hinsichtlich der Permeabilität des Porenraums kann durch die sogenannte relative Permeabilität beschrieben werden. Diese ist definiert als das Verhältnis der hydraulischen Durchlässigkeit für eine bestimmte Phase bei einer Phasensättigung S < 1 zur hydraulischen Durchlässigkeit bei vollständiger Phasensättigung. Das bedeutet, je größer die Sättigung einer Phase ist, desto leichter kann diese Phase strömen und desto schwerer kann die jeweils andere Phase strömen. In Tonsteinen wird zudem ein gewisser Anteil der flüssigen Phase durch physikochemische Prozesse an den Mineraloberflächen oder in feinen Poren (Kapillareffekt) gebunden. Dieser immobile Phasenanteil wird residuale Phasensättigung genannt. Am advektiven Fluss können nur die mobilen Phasenanteile teilnehmen. Die immobilen Phasenanteile reduzieren den Porenraum und somit die Permeabilität (relative Permeabilität).

Die Phasensättigung beeinflusst zudem den Kapillardruck. Kapillarkräfte entstehen an der Grenzfläche zwischen zwei nicht mischbaren Fluiden. Für den Kapillardruck an der Grenzfläche der Fluide gilt p_c :

$$p_{\rm c} = p_{\rm gas} - p_{\rm liq}, \tag{2.1}$$

hierbei ist p_{liq} der Druck der Flüssigkeit (benetzende Phase) und p_{gas} der Druck des Gases (nicht benetzende Phase). Bei vollständiger Sättigung des Porenraumes mit

Flüssigkeit ist der Kapillardruck null. Der Wassertransport unter teilgesättigten Bedingungen ist insbesondere vom Kapillardruckunterschied abhängig. Dieser ist abhängig von der Temperatur, dem Tonmineralanteil und dem Sättigungsgrad.

Bei vollständiger Sättigung des Porenraumes mit Flüssigkeit bewirken die Kohäsionskräfte zwischen der Flüssigkeit und dem Feststoff (also die Kapillarkräfte) einen Gegendruck, wenn Gas in diesen Porenraum eindringen will. Dann muss ein bestimmter Gasdruck aufgewendet werden, um einen durchgängigen Porenraum zu schaffen, in dem die Gasphase strömen kann. Dieser Gasdruck wird Gaseindringdruck genannt /KRÖ 09/. Die Kapillarkräfte nehmen mit zunehmender Größe der Poren ab. Daher werden zuerst große Poren entwässert und mit steigendem Gasdruck auch feinere.

Der Gaseindringdruck ist also ein Ergebnis der Gasphasenmobilität (die sich aus der Schaffung eines durchgängigen gasgefüllten Porenraums ergibt) und den Kapillarkräften, die aufgewendet werden müssen, um diese Mobilität zu erreichen. Wenn das Gas nicht entweichen bzw. das Wasser verdrängen kann, baut sich ein hoher Gasdruck auf. Dieser kann, wenn er die minimale Hauptspannung des Tonsteines übersteigt, zu sekundären Wegsamkeiten (Dilatanz) führen. Nach /MIE 10/ sind folgende Mechanismen der Gasmigration im Tonstein maßgebend:

- Auflösen der Gase im Porenwasser und Diffusion in der Flüssigphase,
- Diffusiver und advektiver Transport im gasgefüllten Porenvolumen, wenn der Porenraum nicht vollständig gesättigt ist,
- Zweiphasen Gas-Wasser-Fluss im Porenraum, wenn der Gaseindringdruck überschritten wird und Wasser verdrängt wird,
- Gasfluss in Mikrorissen, wenn der Gasdruck die minimale Hauptspannung übersteigt und sich hydraulische Wegsamkeiten bilden,
- Gasfluss auf Makrorissen, wenn der Gasdruck die minimale Hauptspannung übersteigt und die Gaserzeugungsrate so hoch ist, dass die Gase nicht durch die Mikrorisse entweichen können.

Nach /OLI 00/ wurde bei Labormessungen von Tonbarrieren eine um 6 Größenordnungen höhere intrinsische⁴ Gaspermeabilität im Gegensatz zur intrinsischen Permeabilität für Flüssigkeit beobachtet.

Nach /BUR 16/ ist der Gaseindringdruck ungestörter Tonsteine im Allgemeinen so hoch, dass kein Auftreten eines Zweiphasenflusses bei voller Flüssigkeitssättigung zu erwarten ist. Es bilden sich eher zusätzliche Wegsamkeiten durch Porenaufweitung. Durch das Ansteigen des Gasdrucks wird irgendwann die minimale Hauptspannung des Tonsteins überschritten. Dadurch wird das Korngerüst gedehnt und der Porenraum vergrößert sich. Im direkten Zusammenhang erhöht sich auch die Permeabilität /JAH 16/. Wurde die Zugfestigkeit des Gesteins nicht überschritten, stellt sich die ursprüngliche Permeabilität nach Reduzierung des Gasdruckes wieder ein. Sind die minimale Hauptspannung sowie die Zugfestigkeit überschritten, können dilatante Strömungspfade entstehen. Für den Prozess Porenaufweitung existiert nach /BUR 16/ derzeit weder eine mechanistische Beschreibung, noch ein allgemein akzeptiertes phänomenologisches Modell (siehe auch /SHA 13/). Wenn es zu einem Gastransport im Wirtsgestein durch Porenaufweitung kommt, ist bei dem derzeitigen Stand von Wissenschaft und Technik bezüglich der physikalisch-geomechanischen Gesetzmäßigkeiten der Porenaufweitung und dem Fehlen allgemein anerkannter Modelle, der Integritätsnachweis für Barrieren schwierig /BUR 16/.

Der Einfluss eines Temperaturgradienten auf den Wassertransport in der Flüssigphase ist klein und indirekt auf die Beeinflussung des Wasserrückhaltevermögens und der Dichte zurückzuführen /SKB 10/. Eine Temperaturänderung beeinflusst jedoch direkt die Dampfdruckbeziehung und somit ebenfalls die Evaporation bzw. Kondensation der Phasen.

Ein Transportprozess, welcher im Wesentlichen nur in klüftigen Materialien zum Tragen kommt, ist der Kolloidtransport. Kolloide sind Tonmineralplättchen, an die Radionuklide adsorbiert und transportiert werden können. In klüftigen Gesteinen mit guter Kluftvernetzung können Kolloide über weite Strecken transportiert werden. Die Verhinderung einer Kolloidbildung wird durch ein geeignetes geochemisches und hydraulisches Milieu gewährleistet /SCH 12a/. Für das Wirtsgestein Tonstein ist dieser Prozess aufgrund der geringen Permeabilität eher untergeordnet.

⁴ Reine Gesteinsdurchlässigkeit, ohne Fluideigenschaften, wie Dichte und Viskosität

2.3.2 Diffusion und Dispersion

Diffusion ist ein Ausgleichsvorgang (brownsche Molekularbewegung), welcher einen Stofftransport von einem Gebiet höherer Konzentration zu einem Gebiet niedrigerer Konzentration induziert. Der Prozess führt zu einem Ausgleich bzw. einer Durchmischung von Konzentrationsunterschieden. Die Ausgleichsbewegung kann durch das erste Fick[']sche Gesetz beschrieben werden (Gleichung (2.2)).

$$J_{\chi} = -D \frac{\partial C}{\partial x}$$
(2.2)

- J_x Diffusionsstromdichte in x-Richtung [m2/s]
- D Diffusionskoeffizient [m2/s]
- C Teilchenzahldichte [m3]
- x Weglänge [m]

Der Diffusionskoeffizient beschreibt hierbei das Maß für die Beweglichkeit von Teilchen innerhalb einer Phase. Es wird zwischen Diffusionskoeffizienten in Lösungen und im Gas unterschieden. Zudem sind die Diffusionskoeffizienten im Tonstein aufgrund der Schichtung des Tongefüges in der Regel anisotrop. Der Transport parallel ist "schneller" als senkrecht zur Schichtung. Die Diffusion ist insbesondere von der Temperatur und in Gasen zusätzlich vom Druck abhängig.

Der Diffusionsprozess in porösen Medien unterscheidet sich von dem in freiem Wasser. Aufgrund elektromagnetischer Wechselwirkungen zwischen dem Feststoff und der diffundierenden Stoffe (z. B. Radionuklide), sind die zugängliche Porosität und der Diffusionskoeffizient von der diffundierenden Spezies abhängig (effektiver Diffusionskoeffizient). Die für die Diffusion effektive Porosität ist somit elementspezifisch.

Ein weiterer Prozess, welcher zur Aufweitung von Stoffkonzentrationen führt, ist die Dispersion. Dispersion ist ein makroskopischer Prozess, welcher zu unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten innerhalb des Porenraumes eines Materiales, aufgrund unterschiedlicher Porendurchmesser und Porengeometrien führt. Die unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten führen in der Regel zur Bildung einer Stofffahne, bzw. die Konzentration eines transportierten Stoffes wird räumlich verdünnt. Aufgrund der sehr geringen hydraulischen Durchlässigkeit ist die Diffusion im ungestörten Tonstein der dominierende Prozess für den Stofftransport in Lösung.

Im Folgenden sind einige Prozesse, welche die Diffusion im Tonstein beeinflussen, nach /RÜB 07/ aufgelistet:

- Die Tonmatrix besitzt eine negative elektrische Oberflächenladung an ihrer Grenzfläche zum Porenwasser, da einige der Gitterionen durch andere Ionen mit einer höheren Anzahl von Valenzelektronen ersetzt werden. Anionen, die im Porenwasser gelöst sind, werden von der negativ geladenen Tonoberfläche abgestoßen und liegen vorzugsweise im mittleren Teil der Poren. Diese Verringerung der zugänglichen Porosität wird als Anionenausschluss bezeichnet. Die nicht oder gering sorbierenden anionischen Nuklide J-129, Se-79 und CI-38 sind Beispiele hierfür. Die effektive Porosität zur Diffusion von Anionen ist im Gegensatz zu Kationen somit geringer und die Bewegung ist stark gehemmt. Für Kationen kann in der Regel angenommen werden, dass die diffusionszugängliche Porosität der absoluten Porosität entspricht.
- Die elektrische Oberflächenladung der Tonmatrix an der Grenzfläche zum Porenwasser führt andererseits zu einer starken Bindung der Wassermoleküle an der Grenzfläche. Stoffe, die im Porenwasser gelöst sind, können diese sogenannte Stern-Gouy-Schicht kaum durchdringen. Daher wird der für die Diffusion zugängliche Porenraum durch die Stern-Gouy-Schicht reduziert. Dieser Effekt gilt auch für nicht geladene diffundierende Stoffe, ist aber im Vergleich zum Anionenausschluss gering.
- Einige der im Porenwasser gelösten Stoffe sind zu groß, um durch die kleineren Poren in Tonstein strömen zu können. Dieser Effekt wird als Filtration bezeichnet und wirkt primär auf kolloidale Schadstoffkomplexe.

2.3.3 Geomechanisches Verhalten

Tonstein ist ein Dreiphasensystem, welches aus dem Mineralgefüge, Wasser und Luft besteht. Der Porenraum von Tonsteinen ist in der Regel mit einem gewissen Fluidgehalt gefüllt. Wenn eine Spannung bzw. ein gerichteter Druck auf eine Tonsteinprobe wirkt, wird diese Spannung zum einen von dem Mineralgefüge aber auch von der inkompressiblen Flüssigphase und zum Teil von der kompressiblen Gasphase aufgenommen. In der Abb. 2.3 ist schematisch ein mit Flüssigkeit gesättigtes Tonvolumen dargestellt.





Nach Terzaghi /TER 43/ unterteilt sich die (totale) Spannung bzw. Druck der z. B. auf eine Materialprobe wirkt, in eine effektive Spannung (Tonpartikel bzw. Mineralgefüge) und den Porenwasserdruck (neutrale Spannung) (Abb. 2.3). Der Porendruck wirkt nur zu einem gewissen Anteil der (totalen) Spannung entgegen. Deshalb wurde die ursprüngliche Gleichung nach Terzaghi um den so genannten Biot-Koeffizienten erweitert (Gleichung (2.3)).

$$\sigma^{\rm eff} = \sigma^{\rm tot} - \alpha \cdot p$$

(2.3)

- σ^{eff} effektive Spannung [Pa] σ^{tot} totale Spannung [Pa]
- α Biot-Koeffizient [-]
- p Fluiddruck [Pa]

Die effektive Spannung, also die Spannung die nur von dem Mineralgefüge getragen wird und nicht vom Porenwasser, kann nach /ZHA 13/ in drei Teile unterteilt werden:

- a) der Belastung, die auf eine feste Kontaktfläche wirkt,
- b) der Quelldruck, der im intergranularen Porenwasser wirkt und abhängig von der effektiven Flüssigkeitssättigung ist und
- c) der Quelldruck im gesättigten Zustand in Abhängigkeit von der Wasseraufnahme.

Entscheidend für den zeitlichen Verlauf des Spannungsaufbaus ist, ob das Material drainiert (permeabel) oder undrainiert (undurchlässig) ist. Je nachdem wie gut Flüssigkeit aus dem Material entweichen kann, ist der zeitliche Porendruckauf/-abbau unterschiedlich, hierbei ist insbesondere die Belastungsgeschwindigkeit entscheidend.

Im Folgenden wird das Spannungs-Verformungsverhalten von Tonstein bei einer Druckbelastung näher erläutert:

Zu Beginn einer Druckbelastung verhält sich Tonstein zunächst elasto-plastisch. Bei fortschreitender Druckerhöhung wird irgendwann die Bruchgrenze erreicht und es entstehen nicht vernetzte Mikrorisse. Mit fortschreitender Erhöhung der Belastung nimmt die Anzahl, die Vernetzung und die Kluftweite der Risse zu, bis irgendwann Makrorisse entstehen.

Die Abb. 2.4 zeigt das Spannungs-Verformungsverhalten einer COx-Tonsteinprobe während eines Triaxialversuchs⁵. Dargestellt ist die radiale (grüne Kurve) und axiale (blaue Kurve) Dehnung in Bezug zur deviatorischen Spannung. Mit beginnender axialer Dehnung der Probe erfährt diese zunächst eine Volumenabnahme (Kompaktion), dann eine Volumenzunahme (Dilatation). Die Volumenzunahme eines Materials aufgrund einer Gefügeschädigung wird als Dilatanz bezeichnet. Dilatanz findet unterhalb der Bruch- und oberhalb der sogenannten Dilatanzgrenze statt. Unter der Dilatanzgrenze (auch Dilatanzfestigkeit genannt) versteht man in der Regel den Spannungszustand, bei dem eine makroskopisch feststellbare Volumenzunahme $\Delta \varepsilon_{Vol}$ beginnt. Die Dilatanzgrenze bzw. Dilatanzfestigkeit σ_D wird am Minimum der volumetrischen Deh-

⁵ Bei einem Triaxialversuch wird ein, in der Regel zylindrischer Probekörper, gleichzeitig sowohl axial als auch radial belastet, wobei das Verhältnis zwischen radialer und axialer Belastung variiert wird. Bei dem Einaxialen-Druckversuch wird der Probenkörper nur in einer Richtung belastet /BRA 08/.

nung (rosa Kurve) abgegriffen. Nach Erreichen der Spitzenfestigkeit kommt es zum Versagen des Materials an der Bruchgrenze σ_F /ZHA 10/, /WEH 06/.

Wenn sich ein Rissnetzwerk bildet, erhöht sich die initiale Permeabilität des Tonsteins, über mehrere Größenordnungen. Die Bruch- bzw. Festigkeits- und die Dilatanzgrenze steigen mit der Erhöhung der minimalen Hauptspannung /ZHA 13/.



Abb. 2.4 Spannungs-Verformungsverhalten während eines Triaxialversuchs von Tonstein (COx Tonstein) aus /ZHA 10/

Tonsteine, insbesondere die mit einem hohen Anteil an Dreischicht-Tonmineralen, haben ein hohes Potential zur Wasseraufnahme. Es können Wassergehalte zwischen 10 - 18 % unter feuchten Bedingungen aufgenommen werden. Die Wasseraufnahme vergrößert die Abstände zwischen festen Partikeln und den Zwischenschichtabstand in Tonmineralen, was eine makroskopische freie Quellung (Volumenzunahme) von bis zu 7 - 13 % bewirkt. Umgekehrt bewirkt der Wasserentzug einen Kollaps der Porenstruktur und einer makroskopischen Schrumpfung von bis zu 1 - 2 %. Wegen der geschichteten Sedimentstruktur ist das Quellen/Schrumpfen senkrecht zur Schichtung bedeutsamer. Parallel zur Schichtung können Brüche als Folge des Schrumpfens auftreten. Der signifikante Einfluss von trocknen und benetzen auf die einaxialen Kriech- und Spannungszustände deuten darauf hin, dass das adsorbierte Porenwasser bei der Verformung von Tonsteinen die Schlüsselrolle spielt. Die mechanischen Eigenschaften, wie elastische Steifigkeit und Festigkeit steigen mit abnehmendem Wassergehalt auf-

grund der Zunahme des Reibungswiderstandes zwischen den Partikeln (hardening). Die elastische Steifigkeit, die einaxiale Dilatanz und die Versagensstärke der getrockneten Tonsteinproben sind 4 bis 5 mal höher als die der gesättigten /ZHA 13/. Die Abb. 2.5 zeigt den Spannungs- (a) und Volumenverlauf (b) von Opalinustonproben die in Triaxialversuchen untersucht wurden. Deutlich wird die Abhängigkeit des Spannungs-Dehnungsverlaufes in Abgängigkeit vom Wassergehalt.



Abb. 2.5 (a) Axialspannung σ₁ und (b) volumetrische Deformation V/V₀ als Funktion der axialen Verformung aus Triaxialversuchen für Opalinuston mit unterschiedlichen Wassergehalten /NAG 01/
Von /CZA 11/ wird nochmal hervorgehoben:

- Das Deformationsverhalten ist bei einer hohen Flüssigkeitssättigung eher plastisch.
 Bei abnehmender Flüssigkeitssättigung verschiebt sich das Materialverhalten von elasto-plastisch bis annähernd linear-elastisch.
- Mit höheren Flüssigkeitssättigungen nimmt die Bruchfestigkeit ab und mit Verringerung der Flüssigkeitssättigung nimmt die Steifigkeit/ Festigkeit des Gesteins zu (hardening). Eine starke Austrocknung führt jedoch zu Schrumpfrissen, welche sich bevorzugt an Schichtungsflächen ausbilden können, welche dann wieder zu einer Entfestigung des Gesteins führen (softening).

Das Deformationsverhalten des COx und Opalinustons ist zeitabhängig. Die Proben kriechen bereits unter sehr niedrigen Spannungen von 1 MPa. Das Kriechen unter Zunahme der Belastung kann in eine transiente Phase und eine nachfolgende stationäre Phase unterschieden werden, während das Kriechen unter niedriger Last zu anfänglich negativen Raten (Expansion) mit einer nachfolgenden Phase positiver Kriechraten führt. Stationäre Kriechraten unter niedrigen Belastungen unterhalb der Bruchgrenze variieren unwesentlich in Abhängigkeit der angelegten Spannung. Oberhalb der Bruchgrenze wird das Kriechen durch die Ausbreitung von Mikrorissen beschleunigt. Das Kriechen von gesättigtem Tonstein wird wahrscheinlich durch Gleitflächen und Brüche von interpartikelgebundenen Wasserfilmen zwischen Mineralteilchen bestimmt /ZHA 13/.

Das Kriechen der Tonsteine wird mit Erhöhung der Temperatur beschleunigt. Unter drainierten Bedingungen führt die Erwärmung zur Mobilisierung, Verdunstung und Freisetzung des Porenwassers aus dem Tonstein. Die Freisetzung führt zu einem Porenkollaps und damit zu einer Konsolidierung. Die thermische Konsolidierung erhöht die Festigkeit des Tonsteins aufgrund der Zunahme des Reibungswiderstandes zwischen den Partikeln /ZHA 13/. Bei verfüllten Hohlräumen kompaktiert die thermisch angetriebene Konvergenz das Versatzmaterial und die EDZ und verbessert so die Barriere-Eigenschaften und die Integrität der natürlichen und geotechnischen Barrieren.

Der gesättigte Tonstein unter undrainierten Verhältnissen dehnt sich beim Erhitzen aus und kontrahiert beim Abkühlen. Die thermische Ausdehnung und Kontraktion sind reversibel und variieren fast linear mit der Temperatur, unabhängig von einer angelegten isostatischen Belastung. Die thermische Ausdehnung und Kontraktion werden überwiegend durch das Porenwasser gesteuert, aufgrund des höheren Ausdehnungskoeffizienten im Vergleich zu den festen Tonpartikeln (thermal pressurization).

Zudem wird das mechanische Verhalten eines Tonsteines signifikant durch die mineralogische Zusammensetzung beeinflusst. Der Karbonatgehalt hat z. B. einen entscheidenden Einfluss auf die Festigkeit. Von /KLI 08/ wurden Untersuchungen zum mechanischen Verhalten am Opalinuston und am Callovo-Oxfordian Tonstein (COx) durchgeführt. Die Versuche zeigten, dass Schwächezonen im Opalinuston in den meisten Fällen entlang von groben Muschel-Fragmenten verlaufen. Wenn die Fragmente nahe beieinander liegen, können sich die Risse miteinander vernetzen. Die Rissbildung ist abhängig von dem Karbonatgehalt, der Größe, Form und der räumlichen Verteilung der Gefügebestandteile. Der COx Tonstein aus Frankreich zeigt ein anderes Verhalten. Der COx enthält überwiegend feinkörnige Carbonate. Hier führt ein höherer Karbonatgehalt zu einer höheren Festigkeit des Gesteins /KLI 08/. Das unterschiedliche gesteinsphysikalische Verhalten der beiden Gesteine lässt sich mikrostrukturell erklären. Die grobkörnigen karbonatischen Schalenbruchstücke im Opalinuston, begünstigen die Bildung von Schwächezonen. Während der COx Tonstein feinkörnige homogen verteilte Carbonate enthält, welche eine festere Gefügestruktur bilden /KLI 08/.

Die Bildung von Schwächezonen wird zudem von Quarz und Pyritaggregaten beeinflusst. Die Verwitterung von Pyrit z. B. spielt eine wichtige Rolle als ergänzende Schadensursache im Gefüge. Ein zunehmender Tongehalt führt zu einem duktilen Verhalten und erhöhter Plastizität /KLI 08/.

In /MAR 14/ wurden Druckversuche an Opalinuston im Labor durchgeführt. Die Versuche zeigten eine Volumenabnahme des Probenkörpers bei Druckbelastung und eine Volumenzunahme nach Entlastung. Die Volumenzunahme während der Entlastung entspricht dem Quellvorgang, vorausgesetzt, dass die Entlastung so langsam ausgeführt wird, dass Wasser aufgenommen werden kann. Die Quelldrücke zeigen unterschiedliche Druckwerte senkrecht und parallel zur Schichtung. Dies zeigt eine Anisotropie des mechanischen Verhaltens aufgrund der Schichtung. Unter wassergesättigten Verhältnissen zeigt eine Probe unter Druckbelastung eine Primärkonsolidierung und eine Sekundärkonsolidierung. Dieses Verhalten ist zeitabhängig und ist auf die geringe Permeabilität zurückzuführen, welche einen langsamen Abbau der Druckgradienten im Porenraum induziert /MAR 14/. In /ZHA 13/ wurden COx und Opalinuston Proben verdichtet und das Verheilungsverhalten des Gefüges untersucht. Das Bruchgefüge verheilt mit zunehmender normaler Begrenzungsspannung nichtlinear. Die Permeabilität reduziert sich. Eine Zunahme der Flüssigkeitssättigung induziert die Quellung der Tonmatrix sowie das Füllen und Verstopfen der Porenhohlräume. Dies führt zu einer drastischen Abnahme der Permeabilität um mehrere Größenordnungen, im Vergleich zur anfänglichen Gaspermeabilität. Das Erwärmen der Proben bis zu 90 °C hat keinen bemerkenswerten Einfluss auf die Wasserdurchlässigkeit, während die Abkühlung die Permeabilität geringfügig verringert. Die thermisch induzierten Änderungen der hydraulischen Leitfähigkeit sind hauptsächlich auf die Variationen der Wasserviskosität und der Dichte zurückzuführen /ZHA 13/.

Aus den in Uni- und Triaxialversuchen ermittelten Verformungskurven, kann zusätzlich die maximale Vorbelastung bzw. der maximale Überlagerungsdruck abgeleitet werden, dem das Gestein in der Erdgeschichte ausgesetzt war. Das Verhältnis des maximalen Überlagerungsdrucks gegenüber dem herrschenden (in situ) Überlagerungsdruck wird durch das Überkonsolidierungsverhältnis (OCR) ausgedrückt. Überkonsolidierte Gesteine haben ein OCR Verhältnis größer 1 /MAR 14/.

2.3.4 Quellprozess

Die Quellfähigkeit von Tonsteinen wird überwiegend durch die Art der Tonminerale bestimmt. Tonminerale z. B. der Smektit-Gruppe (wie Montmorillonit) und Wechsellagerungsminerale mit Montmorillonit-Anteilen (Dreischicht-Tonminerale) besitzen eine hohe Quellfähigkeit. Tonminerale der Illit-Gruppe besitzen eine vergleichsweise geringe Quellfähigkeit.

Der Quellprozess von Tonstein kann in zwei Hauptprozesse unterschieden werden, die intrakristalline und osmotische Quellung (Abb. 2.6). Intrakristalline Quellung (Abb. 2.6 a) wird der Hydratation von Zwischenschichtkationen zugeschrieben. Die Wassermoleküle orientieren sich mit ihrem Dipol zum Kation und schwächen die elektrostatische Wechselwirkung der Tonmineraloberflächen mit den Zwischenschichtkationen. Osmotische Quellung wird durch unterschiedliche Ionenkonzentrationen zwischen der Porenlösung und dem eingelagerten Wasser in der Zwischenschicht verursacht (Abb. 2.6 b) /HEI 90/, /KLI 08/, /HOF 03/.



Abb. 2.6 a) innerkristalline Quellung mit der Einlagerung von Wassermolekülen und dem b) Prinzip der osmotischen Quellung (verändert nach /NIX 03/)

Nach /JAH 16/ zeigen Quelldruckversuche an Opalinuston-Proben eine deutliche Anisotropie. Dies bestätigt die allgemeine Erfahrung, dass durch die Einregelung der Tonteilchen der Quelldruck senkrecht zur Schichtung größer ist, als parallel dazu.

Von /HER 06/ wurden Quelldruckversuche an reinen MX-80- und Calcigel-Bentoniten unterschiedlicher Kompaktion, mit Lösungen unterschiedlicher Zusammensetzung, unter Variation des pH-Wertes sowie der Temperatur durchgeführt. Diese geotechnischen Materialien werden in der Regel zur Erstellung von Abdichtungen oder als Versatz in aufgefahrenen Hohlräumen verwendet. Es wurde das Ziel verfolgt, ein Modell zu erstellen, das die Prognose der Quelldrücke in Abhängigkeit von der Lösungszusammensetzung erlaubt. Folgende Ergebnisse können hervorgehoben werden:

- Im Kontakt mit Salzlösungen werden Quelldrücke gemessen, welche aber relativ gering sind. Die Variation der Quelldrücke aufgrund der Lösungszusammensetzung ist geringer als erwartet.
- Die Quelldrücke sind stark abhängig vom Kompaktionsgrad.
- Hohe pH-Werte können den Bentonit mineralogisch verändern und die Wasseraufnahmekapazität verringern. Je länger die Reaktionszeiten sind, desto niedrigere Quelldrücke sind zu erwarten.

- Hohe K/Mg-Verhältnisse führen zu niedrigeren Quelldrücken und umgekehrt (Abhängigkeit von der Lösungszusammensetzung).
- Höhere Temperaturen führen zu höheren Quelldrücken.

Die Quellung bzw. Expansion geotechnischer Materialien (z. B. Bentonit als Versatz von Hohlräumen im Endlagerbergwerk) wirkt sich bei Einspannung, z. B. in einer Strecke, auf die Dichte bzw. Porosität und somit auf die hydraulische Durchlässigkeit aus. Die Porosität wird reduziert und die Permeabilität verringert sich. Der Quellprozess ist somit eine wichtige Funktion zur Sicherstellung der Barriereneigenschaften des Versatzes. Zudem wirkt der Quellprozess einer Auflockerung des konturnahen Gebirgsbereiches entgegen und unterstützt den Verheilungsprozess der Auflockerungszone.

2.3.5 Adsorption

Unter Adsorption wird die Anlagerung eines Stoffes an der Oberfläche eines anderen Stoffes verstanden, z. B. die Anlagerung von Radionukliden an Mineraloberflächen. Somit kann Sorption signifikant zur Rückhaltung bzw. verzögerten Freisetzung von Radionukliden beitragen. Nach /MAT 94/ wird die Bindungsart zwischen kurz reichenden chemischen (kovalente Bindung, hydrophobe Bindung, H-Brücken, sterische Orientierungswirkungen), van der Waals- und weiter reichenden elektrostatischen Kräften unterschieden. Die Sorptionsfähigkeit eines Stoffes hängt im Wesentlichen von seinen chemischen Eigenschaften (Größe seiner spezifischen Oberfläche, der Art und Höhe seiner Ladung, den chemischen Eigenschaften der Lösung (z. B. Mineralisation, pH-Wert), der Konzentration des Radionuklids in der Lösung, von den sorbierenden Eigenschaften des durchströmten Materials (z. B. Mineralbestand und Zusammensetzung), von künstlichen und natürlichen Komplexbildnern und vom Verhältnis Volumen-Sorptionsmedium/Sorbensmasse ab /JAH 16/, /BRA 02/.

Die Oberfläche natürlicher Tonminerale ist durch die isomorphe Substitution elektrisch negativ geladen. Die Tonminerale wollen ihre Ladung ausgleichen und binden deshalb Kationen an ihre Oberflächen (Schichtladung). Diese Kationen können durch Radionuklide in kationischer Form ausgetauscht werden. Radionuklide, die in der flüssigen Phase in anionischer Form vorliegen, wie z. B. Iod-129, Technetium-99, Selen-79 und Chlor-36, werden von natürlichen Tonen so gut wie gar nicht adsorbiert und können Barrieren aus Tonstein nahezu ungehindert durchdringen /BEH 07/. Neben der Schichtladung gibt es noch die Kantenladung. An den Mineralkanten können im geringen Maße Anionen in Abhängigkeit vom pH-Wert absorbiert werden. Bei einem pH-Wert < 5 entstehen positive Randladungen in der Struktur aufgrund eines Protonenüberschusses, welche durch Anionen ausgeglichen werden können. Bei einem pH-Bereich von 5 – 6 sind die Kanten ungeladen, jedoch können hier OH-Gruppen durch Sulfat- oder Phosphat-Anionen getauscht werden ("Ligandentausch") Bei einem pH-Wert > 6 entstehen durch Dissoziation von Silanol- und Aluminolgruppen negative Randladungen, welche durch Kationen kompensiert werden /HOF 03/.

Nach /BRA 02/ werden Sorptionsprozesse von folgenden Parametern beeinflusst:

- Spurenelementkonzentrationen und -verteilung in den Eluaten (lonen-Konkurrenz),
- hydrochemische Zusammensetzung bzw. lonenstärke der Wässer,
- Reaktionszeit,
- Wasser-/Feststoffverhältnis,
- Korngrößenverteilung der Sorbenten bzw. Oberfläche pro Masseneinheit,
- anteilige Belegung des Sorbenten mit dem Sorbat,
- Druck,
- Temperatur,
- pH-Wert,
- Redox-Potential,
- lithologische Zusammensetzung der Wirtsgesteine.

2.3.6 Gasbildung

In einem Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle können unterschiedliche Gasbildungsprozesse auftreten. Die Gasbildung ist abhängig vom Standort/Wirtsgestein. Bei hohem CO₂- oder Kerogengehalt im Tonstein, kann möglicherweise unter Wärmeeinwirkung eine relevante Gasbildung stattfinden. Die erwartete bzw. gebildete absolute Gasmenge im Endlager wird in der Reihenfolge der folgenden Aufzählung geringer /FRI 12/:

- 1. Gasbildung durch aerobe und anaerobe Metallkorrosion
- 2. Gasbildung durch mikrobielle Prozesse (Zersetzung von Organika)
- 3. Thermochemische und mikrobielle Sulfatreduktion
- 4. Thermische Beeinflussung von Kohlenwasserstoffen
- 5. Radiolytische Gasbildung
- 6. Freisetzung von Spaltgasen

Abfallbehälter zur Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Tonstein können aus Eisen (Gußeisen, Baustahl) und Aluminium bestehen. Diese unterliegen in Gegenwart von Sauerstoff der aeroben Korrosion. Es wird erwartet, dass der verfügbare Sauerstoff im Endlager in wenigen Jahren nach dem Verschluss verbraucht ist. Aufgrund der relativen Reaktionsgeschwindigkeiten der Oxidationsprozesse sowie der Mengenverhältnisse der Organika und Metalle ist davon auszugehen, dass in der Nachverschlussphase die Gasbildung durch anaerobe Korrosion der Metalle überwiegt /BEU 12/.

Während der anaeroben Korrosion werden unedle Metalle wie Eisen, Aluminium und Zink in Gegenwart von Wasser oxidiert. Als Produkte entstehen Wasserstoff und die entsprechenden Metalloxide und -hydroxide. Bei aktiv korrodierenden Werkstoffen (Baustähle, Sphäroguss) erfolgt der Korrosionsfortschritt gleichmäßig über die Oberfläche. Bei Edelstählen könnte sich Lochfraß ausbilden, welcher die Behälteroberfläche punktuell wesentlich schneller korrodiert /WOL 12/.

In den Abfall-Behältern befindet sich zudem in größerer Menge Polyethylen, welches als Neutronenabsorber eingesetzt wird. Polyethylen kann durch mikrobielle Prozesse zersetzt werden wodurch Gas erzeugt wird. Die Aktivität der Bakterien hängt von der Art der organischen Stoffe und von den lokalen Lebensbedingungen (wie z. B. Temperatur und Salinitätsgehalt) im Endlager ab /RÜB 04/. Die mikrobielle Zersetzung der organischen Stoffe benötigt Wasser bzw. Oxidantien. Je nach vorhandenen Reaktanden und geochemischen Milieu laufen Reaktionen bevorzugt ab. Nach /RÜB 04/ werden für die vollständige Umsetzung des Polyethylens etwa hunderttausend Jahre angenom-

men. Die maximale Gasbildung, die durch die o.g. Prozesse möglich ist, kann stöchiometrisch anhand einer pauschalen Zusammensetzung für Polyethylen berechnet werden (siehe auch /FRI 12/). Eine hinreichende verfügbare Restfeuchtemasse als Medium bzw. zum Verbrauch ist vorausgesetzt.

In /BUR 16/ werden Abschätzungen zur Gasproduktion im Nahfeld eines Tonsteinstandortes gemacht. Als wichtigster Gasbildungsprozess wird die anaerobe Korrosion von Eisen zu Wasserstoff identifiziert. Bei der Korrosion von einem Kilogramm Eisen werden bis zu 0,535 Normalkubikmeter Wasserstoff gebildet. Der mikrobielle Umwandlungsprozess von Polyethylen ist im Allgemeinen sehr viel langsamer, als die Korrosion von Eisen /BUR 16/.

Nach /BUR 16/ wurde für die Korrosionsrate des Feinkornbaustahls unter den hydrochemischen Bedingungen im Opalinuston ein Wert von 1 μ m/a angenommen. Dar für Gusseisen keine verlässlichen Daten für Korrosion unter den hydrochemischen Verhältnissen im Opalinuston bekannt sind, wurde angenommen, dass das Geschwindigkeitsverhältnis der Korrosionsraten von Gusseisen zu Feinkornbaustahl jenem in hoch salinaren Lösungen von 10:1 entspricht. Somit beträgt die Abtragungsrate für Gusseisen im Endlagerstandortmodell Süd 10 μ m/a. Die Behälter sind nach ca. 180.000 Jahren vollständig korrodiert /BUR 16/.

2.3.7 Geochemische Prozesse

Insbesondere an den Kontaktstellen zwischen unterschiedlichen Materialien (z. B. Wirtsgestein und Streckenausbau) finden chemische Prozesse statt, welche das geochemische Milieu beeinflussen können /AND 05a/.

Die Abb. 2.7 zeigt schematisch den Querschnitt einer versetzten Einlagerungsstrecke mit einem Behälter, welcher auf einem Bentonitauflager aufliegt. Konzentrisch erstrecken sich die verschiedenen Zonen um den Behälter. Behälternah wird der Bentonitversatz durch thermische Effekte oder Korrosionsprodukte des Behälters beeinflusst. Dahinter schließt sich der unveränderte Bentonit an. Wenn die Strecke durch einen Spritzbeton gestützt wird, kann Tonstein/Bentonit im Kontaktbereich ebenfalls chemisch beeinflusst werden.



Abb. 2.7 Schematische Darstellung der zeitabhängigen Degradation der Bentonit-Verfüllung zu einem Zeitpunkt lange nach Verfüllung/Verschluss der BE/HAA-Lagerstollen (aus /NAG 14a/)

Im Folgenden sind prägnante chemisch beeinflusste Zonen, welche sich überwiegend an Kontaktzonen bilden (siehe Abb. 2.7), näher beschrieben.

Alkalische Störung

In der Kontaktzone zwischen den (geo)-technischen Materialien (Bentonit, Streckenausbau) mit dem Wirtsgestein, bildet sich eine durch zementgebundenes Wasser remineralisierte, alkalisch gestörte Zone aus /AND 05a/ (Abb. 2.8). Alkalische Störungen beeinflussen z. B. die Quelleigenschaften bestimmter Tone.

Nach /AND 05a/ untersuchte das europäische Ecoclay-Projekt (Effects of Cement on CLAY barrier performance) /EUR 05/ die Phänomene und Konsequenzen, die mit der Ausbreitung dieser alkalischen Zone in Tonen auftreten. Im Rahmen dieses Projektes zeigte sich, dass es eine geringe Ausdehnung der alkalischen Störung im geologischen Medium und begrenzte Auswirkungen auf die hydraulischen Eigenschaften der Tone (Diffusionsgeschwindigkeit und Permeabilität) und auf die Quellkapazität des Bentonit-versatzes gibt. Die Begrenzung der Effekte der alkalischen Zone ist auf die starke "Pufferleistung" der Tone zurückzuführen. Die alkalische Störung kann durch die Verwen-

dung von sogenannten "niedrig pH"-Zement weiter reduziert werden. Simulationen haben gezeigt, dass die alkalische Störung in der Regel nicht die Ausdehnung der Mikrorisszone (EdZ) übersteigt und keine Änderungen der hydraulischen Eigenschaften hervorruft.



Abb. 2.8 Schema der alkalischen Störung in COx Tonen um die Streckenkontur bzw. dem Streckenausbau bei 100.000 Jahren /AND 05a/

Oxidierende Störung

Der Sauerstoffzutritt aufgrund der Grubenwetter, beeinflusst das chemische Milieu im Wirtsgestein und führt zu mineralogischen Umwandlungen, die durch die Oxidation bestimmter Minerale des Gesteins (vor allem Pyrit und organischer Stoffe) verursacht werden. Dieser Prozess wirkt sich insbesondere auf die permeable Auflockerungszone bzw. die Umgebung der enthaltenden Risse und Spalten aus. Der Oxidationsprozess dringt dabei wenige Zentimeter tief in diese Strukturen ein /AND 05a/.

Eisen/Ton-Störung

Diese Störung, entwickelt sich an den Grenzflächen zwischen den Metallkomponenten der Abfallbehälter und den COx-Tonen. Die Störungszone dringt nur wenige Zentimeter in das entsprechende Material ein /AND 05a/.

2.3.8 Thermisches Verhalten

Die Abfallgebinde werden infolge des radioaktiven Zerfalls durch die wärmeentwickelnden Abfälle aufgeheizt. Diese Zerfallswärme wird über die geotechnischen Materialien im Nahfeld des Abfallgebindes und darauffolgend über das Wirtsgestein abgeleitet.

Der wichtigste Parameter, welcher den Wärmetransport beschreibt, ist die Wärmeleitfähigkeit λ der verschiedenen Materialien. Die Wärmeleitfähigkeit hängt in erster Linie von der Dichte, Wassersättigung und der mineralogischen Zusammensetzung ab. Eine hohe Wärmeleitfähigkeit begünstigt eine Ableitung des Wärmeeintrages durch die Einlagerung von wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und reduziert dadurch eine Gebirgsaufheizung. Die Wärmeleitfähigkeit von wassergesättigtem MX-80-Bentonit, der zu einer Dichte von 2.000 kg/m³ gequollen ist, beträgt zum Beispiel 1,3 W/(m K) /SKB 10/.

Weiterhin sind für den Wärmetransport Kenntnisse zur spezifischen Wärmekapazität notwendig, welche die Wärmemenge beschreibt, die benötigt wird um 1 kg eines Stoffes um 1 °C bzw. Kelvin zu erhöhen /HEE 14/. Die spezifische Wärmekapazität quantifiziert demnach die Wärmemenge, die das Wirtsgestein aufnehmen kann. Eine hohe spezifische Wärmekapazität des Wirtsgesteins wird als günstig angesehen /AKE 02/, da das Gestein eine größere Wärmemenge bei Temperaturerhöhung aufnehmen kann.

Die Erwärmung eines wassergesättigten Porenraums führt in einem geringdurchlässigen Tonstein zu einer Druckerhöhung des Porenfluides. Wenn die Festphase einen wesentlich geringeren thermischen Ausdehnungskoeffizienten besitzt als Wasser, tritt ein Prozess auf der "thermal pressurization" genannt wird. Der thermische Ausdehnungskoeffizient α [1/K] beschreibt die relative Volumenausdehnung eines Stoffes bzgl. der Veränderung seiner Abmessungen bei einer Temperaturänderung von 1 K. Der thermische Ausdehnungskoeffizient ist eine materialspezifische Proportionalitätskonstante zwischen der Temperaturänderung dT und der relativen Längenänderung dL/L eines Festkörpers /HEE 14/. Der Anstieg des Porendruckes kann im ungünstigen Fall so hoch werden, dass die Bruchgrenze bzw. Zuggrenze des Gesteins überschritten wird (Porendruckkriterium). Aufgrund der geringen hydraulischen Durchlässigkeit von Tonstein, kann sich der Druck nur sehr langsam abbauen /RUT 15/.

Im Folgenden werden ausgewählte Erhitzer Versuche in Untertagelaboren beschrieben um die Auswirkungen eines thermischen Eintrages in Tonstein zu erläutern. Das längste bislang durchgeführte Experiment (15 Jahre), welches den Einfluss des thermischen Eintrages auf Bentonit untersucht, ist das FEBEX Experiment /HUE 05/ im Grimsel Untertagelabor in der Schweiz. Das Grimsel Untertagelabor ist im Granit aufgefahren. Die Versuche sollen die Einwirkungen einer Wärmequelle auf Bentonitversatz untersuchen. Da sich das Untertagelabor im Granit befindet, ist der Sättigungsprozess des Versatzes unterschiedlich zu dem in Tonstein. Der Erhitzer hat eine konstante Temperatur von 100 °C. Die Versuche zeigten, dass der Bentonit, welcher sich direkt an den Erhitzern befindet, entsättigt und dadurch kontrahiert. Der äußere Bereich wird durch Formationswässer aufgesättigt und quillt. Der anstehende Granit ist aufgrund der Klüfte relativ inhomogen und dadurch ist auch der Wasserzufluss lokal unterschiedlich. Trotzdem ist der Sättigungsgrad radial relativ homogen. Daraus wurde geschlossen, dass der Sättigungsprozess abhängig von dem Kapillardruck innerhalb des Bentonitversatzes gesteuert wird und weniger von der radialen Wasserverfügbarkeit. Es gibt keine Anzeichen, dass diese Prozesse das Langzeitverhalten negativ beeinflussen /DEL 14/.

Nach /AND 05a/ haben thermische Experimente an Proben gezeigt, dass die mineralogischen Umwandlungen der thermischen Einwirkung vernachlässigbar sind, solange die max. Temperaturen einen gewissen Wert unterschreiten und die Dauer der thermischen Phase nicht zu lang ist. Insbesondere zeigten sie, dass die Anwendung einer Temperatur von 70 °C für einen Zeitraum von 10.000 Jahren keine größeren Störungen verursachte. Dies hängt u. a. damit zusammen, dass die Smektit-Illit-Transformation bei 70 °C zwar abläuft, aber erst ab ca. 80 °C verstärkt eintritt. Weiterführende Informationen zu Prozessen aufgrund thermischer Einwirkungen auf geotechnische Materialien finden sich u. a. in /BRA 19/.

Für das konkrete Endlagerkonzept in /AND 05a/ wurden Kriterien festgelegt, um die den Barrieren zugewiesenen Sicherheitsfunktionen über den gegebenen Zeitraum nicht zu verletzen:

- Eine Temperatur von < 100 °C über mehrere Jahrhunderte und
- eine Rückkehr zu einer Temperatur von unter 70 °C vor 1.000 Jahren.

Im Zuge des EC TIMODAZ-Projektes wurden die thermischen Auswirkungen auf die Auflockerungszone, um aufgefahrene Hohlräume, im Wirtsgestein Tonstein untersucht. Hier wurden unter anderem Versuche zum Kompaktionsverhalten verschiedener Tonsteine durchgeführt (siehe z. B. /ZHA 10/, /DEL 13/). Es zeigte sich, dass die Volu-

menänderung insbesondere vom OCR-Verhältnis (over consolidation ratio, siehe Kap. 2.3.3) abhängig ist. Für den überkonsolidierten Opalinuston wurden drainierte Erhitzerversuche unter in situ Spannungsverhältnissen durchgeführt. Bei einer Temperaturerhöhung zwischen 25 °C und 65 °C, findet eine thermoelastische Expansion statt, gefolgt von einer plastischen Kontraktion ab 65 °C.

Das Phänomen der thermischen Verfestigung wird durch die Umlagerung der Gefügekörner nach einer bestimmten Temperatur erklärt. Es scheint, dass der Tonstein die "Erinnerung" an seine maximal erfahrene Temperatur beibehalten hat, wie überkonsolidierte Tone die Erinnerung an die maximale Last konservieren. Für Opalinustonproben aus unterschiedlichen Versenkungstiefen zeigt sich ein unterschiedliches Verhalten der Volumenänderung bei Temperaturerhöhung /DEL 13/. An Opalinustonproben aus dem Felslabor Mont-Terri wurden Saugspannungsmessungen im Temperaturbereich zwischen 20 und 80 °C durchgeführt (nach /MAR 14/ unveröffentlichte Untersuchungen).

3 Material/Stoffmodelle Ton(-gestein)

In diesem Kapitel steht das (hydraulisch)-geomechanische Materialverhalten von Tonstein und wie dieses (numerisch/mathematisch) in Stoffmodellen abgebildet werden kann im Fokus. In gängigen Berechnungsprogrammen zur Simulation des hydraulischmechanischen Materialverhaltens von Tonstein (siehe Anhang A), sind eine Vielzahl von Stoffmodellen implementiert. Ein Stoff- oder Materialmodell beschreibt die physikalischen Eigenschaften eines Materials und soll vorhersagen, wie und in welchem Maß das Material auf äußere Einflüsse (wie z. B. Druck oder Temperatur) reagiert.

Nicht alle Simulationsprogramme koppeln hydraulische mit mechanischen Prozessen (z. B. die Wechselwirkung des Spannungs-Verformungsverhaltens mit dem Porendruck). Nur wenige Stoffmodelle berücksichtigen zudem das Langzeitverhalten (Kriechverhalten) von Ton/Tonstein. Mit den meisten Stoffmodellen kann ausschließlich das geomechanische Kurzzeit-Deformationsverhalten analysiert werden, das beispielsweise zur Beurteilung der Grubenstabilität während des Erkundungs- oder Einlagerungsbetriebs erforderlich ist. Um das im Kapitel 2 gewonnene Prozessverständnis von Ton/Tonstein anwenden zu können, wird in den folgenden Kapiteln eine Übersicht gegeben, welche Stoffmodelle für Tonstein anwendbar sind und welche Prozesse bzw. Eigenschaften (derzeit) in Stoffmodellen berücksichtigt werden können bzw. sollten.

3.1 Einführung

Um aussagekräftige Stoffmodelle für Tonsteine zu erstellen, müssen die Wechselwirkungen der drei Phasen (Fest, Flüssig und Gas) untereinander berücksichtigt werden. Die Komplexität der Modelle bzw. welche Prozesse berücksichtigt werden sollen, ist im Wesentlichen abhängig von den Fragestellungen. Zunächst muss die Gültigkeit und die Annahmen der Modelle festgelegt werden /WIK 17a/:

- Zulässige bzw. initiale Umgebungsbedingungen wie Temperatur oder Druck.
- Zeitspannen über die das Materialverhalten beobachtet werden soll (Langzeit- oder Kurzzeitverhalten).
- Änderungsraten der Einflussgrößen, wie z. B. statische-, quasi statische- oder moderate Änderungsraten der Einflussgrößen.

- Größenskala der Materialproben. Man unterscheidet die Makro-, Meso- oder Mikroebene.
- Chemischer Zustand. Materialien können durch Alteration ihre Eigenschaften verändern.

In Deutschland wurde in der Vergangenheit insbesondere Salzgestein zur Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle untersucht. Nach /CZA 11/ können die Ergebnisse der endlagerrelevanten Materialforschung für Salzgesteine im Wesentlichen auch auf Tonstein angewendet werden. Tonstein strebt, ähnlich wie Salzgestein, ein Minimum an inneren deviatorischen Spannungen an. Der Unterschied zum Salz, nach dem derzeitigen Kenntnisstand ist, dass Tonstein aufgrund seiner Schichtungseigenschaften anisotrope Spannungszustände aufweist. Isotrope Salzgesteine mit richtungslosem Korngefüge haben im Allgemeinen in alle Raumrichtungen gleiche physikalische Materialeigenschaften (Abb. 3.1). Bei anisotropen Gesteinen wie Tonsteinen sind die Gefügeelemente häufig eingeregelt bzw. in eine Raumrichtung orientiert (Schichtung) (Abb. 3.1).



Abb. 3.1 Schematische Darstellung der verschiedenen Begriffe eines Gesteinsgefüges /NEU 64/

Zudem können die Gesteine tektonisch überprägt sein und Trennflächen aufweisen. Im Korngefüge sind somit Ebenen mit einer bevorzugter Spaltbarkeit bzw. abgeminderter Festigkeit/Steifigkeit vorgegeben /CZA 11/. Dadurch entsteht ein anisotropes thermisch-hydraulisch-mechanisches (THM)-Verhalten der Gesteine in den verschiedenen Raumrichtungen.

Grundsätzlich können die Gesteinseigenschaften in ihrer räumlichen Ausdehnung sehr heterogen sein. Es ist zu beachten, dass zur Vereinfachung der Stoffmodelle, in der Kontinuumsmechanik deshalb grundsätzlich einzelne Gefügebestandteile und ihre Eigenschaften zur Vereinfachung der mathematischen Gleichungen als homogene Materialien behandelt werden und die Materialkennwerte als Mittelwerte zu verstehen sind. Wobei für die verschiedenen Raumrichtungen unterschiedliche Parameterwerte, z. B. für die Festigkeit angenommen werden können.

Mit der Steigerung der Leistungsfähigkeit moderner Computer ist es mittlerweile möglich, die einzelnen Gefügekörner zu modellieren. Die Wechselwirkung zwischen den Körnern wird durch den Ansatz fiktiver Federn und Dämpfer berücksichtigt /KOL 11/. In diesem Bericht beschränken sich die Beschreibungen zu Materialmodellen jedoch auf homogene Körper (Kontinuumsmechanik).

3.1.1 Relevante Prozesse

Relevante Prozesse, welche in Stoffmodellen berücksichtigt werden können, sind ausführlicher im Kap.2.3 beschrieben. Je nach Material und Fragestellung können unterschiedliche Prozesse relevant sein. Im Folgenden werden beispielhaft die hydromechanischen Prozesse möglicher Materialien aufgeführt:

- Anstehendes Wirtsgestein (insb. Auflockerungszone): Änderung des Spannungsfeldes durch Auffahren der Strecken/Hohlräume (Rissbildung), Konsolidierung (Rissschließung), anisotropes Materialverhalten, Auf- und Entsättigungsprozesse (Quellen-Schrumpfen).
- Strecken-Versatz und Abdichtmaterialien (Bentonit- oder Wirtsgesteins-Granulat, Bentonitblöcke):

Auf- und Entsättigungsprozesse (Quellen-Schrumpfen), starke Wärmeeinwirkung (Festigkeit, Wassergehalt, Porendruck), Rissbildung, Konsolidierung (Rissschließung), Porendruckerhöhung durch Gasbildung.

Es können allgemein folgende problem-spezifische (d. h. vor allem werkstoffspezifische) Eigenschaften nach /CZA 11/ und /BRI 05/ in einem Stoffmodell berücksichtigt werden. Die einzelnen Mechanismen werden in den folgenden Kapiteln näher erläutert. Für alle Stoffparameter kann zudem ein anisotropes Materialverhalten berücksichtigt werden.

- Elasto-Plastische Verformungen (der Übergang wird z. B. durch die Fließgrenze⁶ charakterisiert).
- Visko-plastische Verformungen (Kriechen und Kriechbruch).
- Ver- bzw. Entfestigungsgesetz (hardening, softening), welches die Änderung der Fließfunktion bei fortschreitender Verformung spezifiziert (z. B. Änderung der Festigkeit und Steifigkeit durch Ver-/Entfestigung des Materials bei Be- und Entlastung).
- Gefügeschädigung und -verheilung (Schädigungsmodell bzw. Dilatanz, Verheilung durch Konsolidierung).
- Bruch- und Restfestigkeiten.
- Änderung hydraulischer Eigenschaften, Porositäts- und Permeabilitätsentwicklung aufgrund von Deformationen (auch in Bezug auf Schicht- bzw. Schieferungsflächen, modifiziert gegenüber Matrix).
- Einfluss des Wassergehaltes auf die Materialeigenschaften, wie die Festigkeitszunahme bei Wasserentzug (schrumpfen) und die Entfestigung bei Wasseraufnahme (Quellverhalten). Zudem Einfluss auf die Zweiphasenflussparameter.
- Abhängigkeit der Materialeigenschaften und der mechanischen Wirkung vom Porenwasserdruck (effektive Spannungen).
- Abhängigkeit der Materialeigenschaften von der Temperatur (z. B. Porendruckveränderung und Ausdehnung des Materials).

Materialparameter, welche das mechanische Materialverhalten signifikant beeinflussen sind die Festigkeit und die Steifigkeit. Die Verformung von Tonsteinen beeinflusst deren Eigenschaften. Das bedeutet, dass z. B. die Festigkeit und Steifigkeit vor und nach

⁶ Bei duktilen Werkstoffen treten bleibende plastische Verformungen im Allgemeinen nach dem Überschreiten eines bestimmten Spannungsniveaus auf, der so genannten Fließgrenze /ALT 15/.

einer Belastung nicht denselben Wert hat. Im Folgenden werden die beeinflussenden Prozesse kurz erläutert. Die Steifigkeit wird beeinflusst durch:

- die Materialdichte bzw. Porosität,
- drainierte oder undrainierte Verhältnisse,
- das Konsolidierungsverhältnis und
- durch eine Anisotropie der Festigkeit.

Die Steifigkeit wird beeinflusst vom Spannungsniveau. Je höher die Belastung ist, desto größer ist die Steifigkeit. Daraus resultiert, je tiefer das Material im Untergrund "versenkt" wurde, desto größer ist die Steifigkeit. Zudem ist die Steifigkeit abhängig vom:

- Belastungspfad (Be- und Entlastung),
- dem Dehnungsniveau (Grundsätzlich je kleiner der Deformationsgrad ist, desto größer ist die Steifigkeit),
- der Materialdichte und der Permeabilität,
- dem Konsolidierungsverhältnis und der richtungsabhängigen Steifigkeit (Steifigkeitsanisotropie).

Die verschiedenen THM-Prozesse beeinflussen sich gegenseitig bzw. sind voneinander abhängig. Die Abb. 3.2 soll beispielhaft die Abhängigkeit der geomechanischen THM-Prozesse schematisch verdeutlichen (ohne Anspruch auf Vollständigkeit). Vor allem sind hydraulische und mechanische Materialeigenschaften stark voneinander abhängig.



Mechanische Eigenschaften

Abb. 3.2 Schematische Darstellung der THM-Kopplung und deren Wechselwirkung (verändert nach /ZHA 10/)

Die THM-Einwirkungen auf ein Material wirken sich zudem direkt und indirekt auch auf die chemischen Eigenschaften, wie z. B. die Sorption aus. Einwirkungen auf chemische Prozesse werden hier nur am Rande erwähnt.

3.1.2 Spannungs-Verformungsverhalten von Tonstein

Grundsätzlich kann das Spannungs-Verformungsverhalten von Tonstein in einen elastischen (reversiblen) Anteil und einen elasto-plastischen-viskosen Anteil mit einer reversiblen und einer irreversiblen Komponente unterschieden werden. Nach /AME 07/ ist das Spannungs-Verformungsverhalten von Tonstein zeitabhängig. Das Verformungsverhalten kann in ein kurzzeitiges und langzeitiges Materialverhalten unterschieden werden. Nach /CZA 11/ ist die Reaktion von Tonstein auf Beanspruchungsänderungen mit einem elastischen Stoffmodell immer instantan. Inelastische Verformungsvorgänge können in plastisches Fließen (zeitunabhängig/zeitabhängig) und in ein viskoses Fließen (immer zeitabhängig) unterschieden werden. Wenn im Spannungs-Dehnungs-Diagramm eine von der Dehnungsgeschwindigkeit abhängige Hysterese beobachtet wird, die auch bei sehr langsamen Spannungs-Dehnungs-Verläufen nicht verschwindet, liegt Viskoplastizität vor /KOL 11/. Während das plastische Fließen an die Überschreitung einer Fließ-/Versagensgrenze gebunden ist, erfolgt das viskose Fließen unabhängig von der Überschreitung einer Grenzbeanspruchung. In der Regel werden für elasto-plastische Stoffmodelle für Festgestein die Scherfestigkeiten berücksichtigt. Bei den visko-plastischen Stoffmodellen werden zusätzliche Viskositätsparameter eingeführt, um so das zeitliche Spannungsdehnungsverhalten simulieren zu können /SCH 09/.

Nach /CZA 11/ kann die Verformung ε eines Materials im allgemeinen Fall in einen elastischen ε^{el} , einen thermischen ε^{th} , einen plastischen ε^{p} und einen viskosen ε^{v} Anteil unterteilt werden. Mit der Boltzmann'schen Hypothese von der Additivität der verschiedenen Verzerrungsanteile folgt dann:

$$\varepsilon = \varepsilon^{el} + \varepsilon^{th} + \varepsilon^p + \varepsilon^v \tag{3.1}$$

Das Bruchverhalten von Tonproben bei Kompaktion kann in eine Phase vor dem Versagen (pre peak) und nach dem Versagen (post peak) eingeteilt werden. Vor dem Versagen steigt die Festigkeit an (strain-hardening, Abb. 3.3-d), verbunden mit einer Abnahme des Wassergehaltes und der Porenzahl. Nach dem Versagen entfestigt sich die Probe bei größerer Scherdehnung (strain-weakening, Abb. 3.3-b) /MAR 14/. Zu berücksichtigen ist die Festigkeitsanisotropie bei Belastungen parallel oder senkrecht zur Schichtung.

In Festgesteinen kann sich zudem das Bruchverhalten von Trennflächen und der Gesteinsmatrix unterscheiden. Je nach Bruchverhalten können nur bestimmte Stoffmodelle angewendet werden. Bei mechanischer Beanspruchung können Tonsteine entweder ein sprödes oder ein duktiles Verhalten zeigen. Der Übergang zwischen beiden Verhalten ist insbesondere abhängig vom Flüssigkeitsgehalt und dem Konsolidierungsgrad /LEP 15/. Die Abb. 3.3 zeigt beispielhaft die verschiedenen Bruchverhalten von Gesteinen.



Abb. 3.3 Beispiele für das Bruchverhalten von Fels: a) spröd mit Entfestigung, b) duktil mit Entfestigung, c) duktil und ideal-plastisch und d) duktil mit Verfestigung /WIT 17/

Es ist zu beachten, dass für bestimmte Materialien (z. B. Lockersedimente oder Festgesteine) nicht alle Stoffmodelle anwendbar sind. Es kann Unterschiede zwischen unverfestigten Ton und verfestigten Tonstein geben. Plastizitätsmodelle, die für lehmige Böden vorgeschlagen wurden, eignen sich möglicherweise nicht für steifere und spröde Materialien wie Tonsteine, die sowohl ein plastisches als auch ein sprödes Bruch-Verhalten aufweisen. Modelle die eine Materialschädigung und Plastizität verbinden, sind oft Material- und Belastungspfad spezifisch und schwer auf weitere Problemstellungen im Zusammenhang mit gekoppelten Auswirkungen von mechanischer Belastung und Saugspannung in ungesättigten porösen Medien anzuwenden /LEP 15/.

Ein Problem, welches in /SCH 09/ für multilaminare Modelle beschrieben wird, stellt die Datenerhebung für komplexe Stoffmodelle dar. Die richtige Wahl des Verfahrens zur Ermittlung der Stoffparameter ist abhängig vom Stoffmodell bzw. welcher Prozess in einem Stoffmodell abgebildet werden soll. Zur Ermittlung der Parameter, welche die physikalischen Eigenschaften eines Materials beschreiben, müssen in der Regel aufwendige in-Situ bzw. Laboruntersuchungen an Proben durchgeführt werden. Denn je komplexer das Stoffmodell aufgebaut ist und je mehr Prozesse berücksichtigt werden sollen, desto mehr Daten müssen auch erhoben werden. Die Datenerhebung wird erschwert durch die Inhomogenität innerhalb der Gesteinsformationen und der Messungenauigkeiten. Deshalb ist genau zu prüfen ob nicht ein einfacheres Modell in Bezug auf die entstehenden Ungenauigkeiten bei komplexen Modellen ausreicht bzw. zweckmäßiger ist.

Gängige Verfahren um das Spannungs-Verformungsverhalten zu untersuchen, sind z. B. Ödometerversuche, einaxiale Druckversuche, oder triaxiale Druckversuche. Die Belastungen können statisch oder zyklisch auf die Proben angewendet werden, d. h. es wird das Verhalten auf Be- und Entlastung untersucht. Entscheidend für das Span-

nungs-Verformungsverhalten ist, ob die Versuche drainiert oder undrainiert durchgeführt werden.

3.2 Materialverhalten von Opalinuston und COx-Tonstein

Im Folgenden wird beispielhaft das in Laborversuchen beobachtete Materialverhalten von COx Tonstein und Opalinuston beschrieben. Entscheidend für das Materialverhalten ist, ob die Laborversuche drainiert oder undrainiert durchgeführt wurden. Für eine wassergesättigte, drainierte Probe kann zunächst bei einer Belastung ein Wasserausfluss beobachtet werden. Dieser Prozess der Primärkonsolidierung ist zeitabhängig und hält so lange an, bis kein hydraulischer Gradient des Porenwassers mehr existiert und kein Wasserausfluss aus der Probe mehr messbar ist. Aufgrund der geringen intrinsischen Permeabilität von Tonstein wird ein hydraulischer Gradient über längere Zeiträume aufrechterhalten, bis der Porenwasserdruck aufgrund der Volumenänderung wieder abgebaut werden kann. Wenn bei stetiger Belastungssteigerung kein Wasserfluss aus der Probe mehr messbar ist, ist eine fortschreitende Volumenreduktion messbar. Diese Verformung wird Sekundärkonsolidierung genannt. Die Konsolidierung führt ab bestimmten Belastungen zu einer irreversiblen plastischen Verformungen /MAR 14/. Generell verhält sich Tonstein zunächst elastisch, bis plastische Verformungen entstehen.

Die Abb. 3.4 zeigt beispielhaft das Spannungs-Verformungs- und Dilatanz-Verhalten einer COx Tonsteinprobe im Festigkeitsversuch. Bei einer stetigen Erhöhung der Belastung einer Probe (blaue Kurve), kommt es zunächst zu einer Kompaktion (Volumenabnahme) des Porenraumes und der Gefügebestandteile (rosa Kurve). In dieser Phase können potentielle Risse zunächst verheilen. Wenn die Belastung weiter ansteigt, tritt irgendwann eine Schädigung des Materialgefüges ein. Nach dem Überschreiten einer Schädigungsgrenze akkumulieren sich plastische Dehnungen, die physikalisch mit der Entwicklung und dem Wachstum von Mikrorissen zusammenhängen und durch eine plastische Verfestigung gekennzeichnet sind. Ab einem bestimmten Schädigungsgrad der Probe wechselt die Volumenkompaktion in eine Volumenvergrößerung (Dilatanz).



Abb. 3.4 Beispielhaftes Spannungs-, Verformungs- und Dilatanz-Verhalten von Tonstein im Festigkeitsversuch (COx-Tonstein) aus /ZHA 10/

Nach /NIE 17/ ist Dilatanz die Auflockerung des Korngefüges (Volumenzunahme) infolge einer deviatorischen Beanspruchung eines Materials. Eine dilatante Materialschädigung kann somit bereits vor dem Erreichen der eigentlichen Bruchgrenze eintreten. Bis zum Erreichen der Bruchgrenze kann das Material weitere Belastungen aufnehmen, sie stellt damit die maximale Festigkeit des Materials dar. Nach Überschreiten der Bruchgrenze wird die Festigkeit allmählich auf ihren Restwert reduziert. Die residuale Festigkeit hängt mit der Umwandlung von Mikrorissen in Makrorisse zusammen und ist durch eine plastische Entfestigung gekennzeichnet.

Das Langzeitverhalten ist durch eine visko-plastische Verformung (Kriechen) gekennzeichnet. Mit der Zeit nimmt die Kriechrate ab, wenn sich visko-plastische Verformungen akkumulieren.

3.2.1 Opalinuston

Opalinustonproben zeigten vor dem Erreichen der Bruchgrenze ein nicht-lineares, d. h. inelastisches, Spannungs-Verformungs-Verhalten /BOC 09/. Bei niedrigen Belastungen < 2 MPa wird der Opalinuston kompaktiert. Bei höheren Belastungen oberhalb der Fließgrenze (kann bereits bei 50 % der Bruchfestigkeit einsetzen) beginnen irreversible Schädigungsprozesse /JAH 16/. Das Überschreiten der Spitzenfestigkeit wird im

Spannungs-Dehnungsverhalten durch einen ausgeprägten Festigkeitsabfall (strain weakening oder strain softening) im Nachbruchbereich beobachtet /MAR 14/. Die Änderung des Probenvolumens kann abhängig von der anstehenden Belastung sein. So wurde vor dem Überschreiten der Spitzenfestigkeit bei niedrigeren Spannungen bis etwa 20 MPa eher eine Volumenzunahme und bei hohen Umgebungsspannungen ab etwa 20 MPa eher eine Volumenabnahme beobachtet /MAR 14/.

Der Opalinuston hat im Gegensatz zum COx Tonstein, aufgrund der alpidischen Orogenese, einen komplexen Konsolidierungsprozess durchlaufen. Nach /MAR 14/ kann für den Opalinuston deshalb kein linear-elastisches Verhalten angenommen werden. Der Opalinuston zeigt eine Abhängigkeit der Steifigkeit vom Spannungspfad, die zu einer Kopplung zwischen dem volumetrischen und deviatorischen Verformungsverhalten führt. Nach /MAR 14/ kann der Opalinuston zusammenfassend klassifiziert werden:

- Mäßiger Überkonsolidierungsgrad auf Lagerebene mit OCR-Werten zwischen 1.5 und 4.
- Siltig-sandiger Tonstein bis tonig-sandiger Siltstein mit einer typischen Tonfraktion von 20 – 50 % und einem Tonmineralgehalt von 40 – 80 %.
- Geringe bis mäßige Plastizität (10 < lp < 30).
- Gefüge gekennzeichnet durch homogene sedimentäre Strukturen und markante Schichtung. Inventar und Intensität der tektonischen Strukturen werden bestimmt durch die unterschiedliche tektonische Überprägung in den Standortgebieten.
- Ausgeprägte Anisotropie der Scherfestigkeit und Steifigkeit, die als Kombination von intrinsischer (struktureller) und induzierter (d. h. durch Überkonsolidierung verursachter) Anisotropie erklärt werden kann.

Nach /MAR 14/ sollten in einer hydro-mechanischen Modellierung insbesondere das Quellvermögen, die Wassergehalts-Festigkeitsbeziehung und die Kapillardruck-Sättigungsbeziehung unter Berücksichtigung der entsprechenden Temperaturabhängigkeiten berücksichtigt werden. Nach /MAR 14/ können für den Opalinuston die aus der Bodenmechanik bekannten Modellkonzepte der sogenannten "critical state⁷"-

⁷ Nach /SCH 68/ besagt die critical-state Theorie, dass Böden und andere granulare Materialien, wenn sie kontinuierlich verformt werden, in einen definierten kritischen Zustand gelangen, in dem sie sich ohne Spannungsänderung kontinuierlich Verformen.

Theorie angewendet werden, da sie dem initialen Spannungszustand des Gesteins (normal konsolidiert, leicht/stark überkonsolidiert) Rechnung tragen und verschiedene isotrope und deviatorische Versagensmechanismen kombinieren. Die der "critical state"-Theorie zugrunde liegenden Hypothesen (z. B. assoziierte Fließregel) limitieren allerdings auch ihren Anwendungsbereich. Folgende Beschränkungen sind nach /MAR 14/ von besonderer Bedeutung:

- Das spröde Verformungsverhalten des Opalinustons bei vergleichsweise geringer Überkonsolidierung wird unzureichend abgebildet.
- Das elastische Verformungsverhalten ist komplex und zeigt eine markante Abhängigkeit vom Dehnungszustand ("small strain" vs. "large strain").
- Das beim Opalinuston beobachtete zeitabhängige Verformungsverhalten ("creep") wird in den critical state Konzepten nicht abgebildet.

Aus ödometrischen Konsolidierungstests und hydraulischen Tests in Triaxialzellen, an Kernproben aus dem Felslabor Mont-Terri und der Geothermiebohrung Schlattingen-1, wurden empirische Beziehungen zwischen Porosität, Permeabilität und mittlerer Effektivspannung abgeleitet. Aus den Untersuchungen konnte ein funktionaler Zusammenhang zwischen Porosität und Permeabilität in Form eines einfachen Potenzansatzes ermittelt werden. Es zeigt sich, dass die Permeabilität und Porosität mit größerer Überlagerungstiefe abnimmt. Die Scherfestigkeit und Steifigkeit sind abhängig von der mittleren Effektivspannung und von der Wassersättigung des Gesteins /MAR 14/.

Nach /THU 99/, /BOC 01/ bzw. /HOU 02/ kann das anisotrope mechanische Verhalten von Opalinuston mit einem transversal anistropischen Stoffmodell beschrieben werden. Die Festigkeit und das Deformationsverhalten von Opalinuston sind richtungsabhängig sowie abhängig vom Wassergehalt. Ein höherer Wassergehalt, als natürlich im Gestein enthalten ist, führt zu einer kleineren Steifigkeit, zu einer geringeren Festigkeit und zu einem stark ausgeprägten elasto-visko-plastischen Verhalten. Die Abhängigkeit des Kriechverhaltens von Richtung und Wassergehalt ist geringer als für Festigkeit und Verformbarkeit.

3.2.2 COx-Tonstein

Nach /SOU 17/ kann das makroskopische mechanische Verhalten von COx Tonstein bei Belastung in zwei Phasen unterteilt werden. In eine irreversible kurzfristige und ei-

ne langfristige zeitabhängige Deformationsphase. Dabei wird das Deformationsverhalten insbesondere vom Flüssigkeitsgehalt beeinflusst. Je nach Durchlässigkeit des Materials kann Porenwasser besser oder schlechter drainiert werden. Dies hat einen Einfluss auf den Porendruck und die (effektiven) Spannungen. In-situ-Messungen im Untertagelabor bei Bure bestätigen diese Beobachtungen. Es lassen sich zwei Hauptprozesse unterscheiden:

- 1. Erste Phase: Das kurzfristige mechanische Verhalten von COx-Tonstein im Untertagelabor in Bure ist geprägt durch ein elasto-plastisches Bruchverhalten.
- Zweite Phase: Ein zeitabhängiges mechanisches (Langzeit)Verhalten des Gesteins, z. B. Kriechen der Gesteinsmatrix und die Öffnung bzw. mögliche Ausbreitung von Klüften, ist in dieser Phase vorherrschend.

Ein wesentliches Merkmal des kurzzeitigen mechanischen Verhaltens unter niedrigen Druckbelastungen ist das spröde Versagen der Proben und die Bildung eines Scherbandes. Im Triaxialversuch wirkt sich die Änderung des radialen Begrenzungsdrucks stark auf das mechanische Nachbruch-Verhalten (nach Erreichen der Spitzenfestigkeit) aus, dass durch einen Übergang vom spröden Versagen zum duktilen Verhalten gekennzeichnet ist.

Nach /MÁN 17/ haben Laboruntersuchungen an COx Tonsteinen aus Bure unter anderem folgendes Materialverhalten aufgezeigt:

- Anisotropie der Festigkeit und Steifigkeit parallel und orthogonal zu den Schichtungsebenen.
- Eine signifikante Nichtlinearität der Spannung, Dehnung und plastischer Verformungen vor der Spitzenfestigkeit. Die Fließgrenze wurde bei etwa 50 % der maximalen deviatorischen Spannung identifiziert.
- Ein quasi-sprödes Verhalten im in-situ-Spannungsbereich mit einem signifikanten Festigkeitsverlust nach dem Maximum der deviatorischen Spannung.
- Kriechverformungen mit steigenden Dehnraten für höhere deviatorische Spannungen.

Nach /SOU 17/ wurden im Untertagelabor bei Bure eine Vielzahl an experimentellen Studien zum Materialverhalten des COx Tonsteines durchgeführt und im Zuge dessen Stoffmodelle abgeleitet. Im Hinblick auf das Kurzzeitverhalten sind die meisten dieser Stoffmodelle elasto-plastisch, mit einem hardening/softening Ansatz und berücksichtigen eine Materialschädigung, entweder durch die Plastizitätstheorie⁸ (mit einer Fließfunktion und Fließbedingung) oder durch die Schädigungsmechanik⁹ (damage mechanics). Einige dieser Modelle sind hydro-mechanisch gekoppelt und berücksichtigen gesättigte und/oder ungesättigte Bedingungen.

In den gekoppelten hydro-mechanischen Stoffmodellen wird die Permeabilität in der Regel als konstant angesehen. Dies entspricht nicht den Beobachtungen, welche eine Änderung der Permeabilität in Abhängigkeit einer Materialschädigung zeigen. Das Langzeitverhalten wird auf der Grundlage des von Perzyna /PER 66/ vorgeschlagenen Konzepts einer Overstress¹⁰-Funktion modelliert. Diese Modelle reproduzieren im Allgemeinen die Hauptmerkmale des mechanischen oder hydromechanischen Verhaltens für Tonsteinproben. Sie sind jedoch nicht in der Lage, die Auswirkungen mikrostruktureller Veränderungen, wie z. B. Porositätsschwankungen explizit zu erfassen /SOU 17/. Dies hat zur Entwicklung rheologischer Modelle auf der Basis eines mikromechanischen Ansatzes geführt. Solche Modelle basieren im Allgemeinen auf verschiedenen "Upscaling"-Methoden, die darauf abzielen, das Gesamtverhalten von Materialien unter Berücksichtigung von Heterogenitäten (Poren, Mineralkörner oder Aggregate) zu bestimmen. Die Anwendung der Modelle ist normalerweise auf den Maßstab von Proben beschränkt und fast alle Modelle berücksichtigen keine verzögerten Deformationen /SOU 17/.

⁸ Die klassische Plastizitätstheorie umfasst die Abgrenzung vom elastischen zum plastischen Zustand durch eine Fließbedingung, sowie die Beschreibung des plastischen Deformationszuwachses durch eine Fließregel und eine mögliche Materialverfestigung durch zusätzliche Entwicklungsgleichungen /BUR 15/.

⁹ Die klassische Kontinuumsmechanik bzw. Plastizitätstheorie berücksichtigt nicht die Entstehung von Rissen bzw. der "Grad" der Materialschädigung kann nicht dargestellt werden. Die "Schädigungsmechanik" (continuum damage theory) beschreibt quantitativ die Schädigungsmechanismen und das Versagensverhalten von Werkstoffen. Es kann zudem der Einfluss der Schädigung auf die Materialparameter, wie z. B. Steifigkeit und Festigkeit, als Folge der Bildung von inneren Defekten/Diskontinuitäten hergestellt werden. Die Materialschädigung wird durch die Einführung von skalaren, vektoriellen oder tensoriellen Größen, den Schädigungsvariablen, charakterisiert. Diese sind Bestandteile der konstitutiven Beziehungen, d. h. die Defekte werden integral im Kontinuumsmodell homogenisiert /KUN 10/. Die Kontinuum-Schädigungsmechanik stellt das Bindeglied zwischen der Kontinuumsmechanik und der Bruchmechanik dar /BUR 15/.

¹⁰ Ein Hauptmerkmal des Perzyna-Modells besteht darin, dass die zur Beschreibung der visko-plastischen Verformung verwendete geschwindigkeits-unabhängige Fließfunktion größer als null werden kann. Dieser Effekt wird als "Overstress" bezeichnet /HEE 02/.

/SOU 11/, /SOU 17/ entwickelten deshalb ein Stoffmodell, welches die Hauptmerkmale des COx-Tonsteins wie oben aufgelistet, zu reproduzieren versucht (siehe Kap. 3.4.4). Insbesondere beinhaltet es eine Festigkeits- und Steifigkeitsanisotropie, eine nichtlineare isotrope Verfestigung für plastische Verformungen vor der Spitzenfestigkeit, Entfestigung nach der Spitzenfestigkeit, eine nicht-assoziierte Fließregel, zeitabhängige Deformationen und die Abhängigkeit der Permeabilität von irreversiblen Verformungen.

Nach /BIA 17/ sollten grundlegende Merkmale des COx-Tonsteins, wie z. B. eine nichtlineare Versagensoberfläche, Ver- und Entfestigung, Übergang von plastischer Kompressibilität zu Dilatanz und eine Abhängigkeit vom Wassergehalt in einem Stoffmodell enthalten sein. Darüber hinaus zeigt der Tonstein ein zeitabhängiges visko-plastisches Verhalten. Dies kann durch die kontinuierliche Konvergenz der Strecken nach Auffahrung beobachtet werden. Um diesem Verhalten Rechnung zu tragen, ist ein elastoplastisches und visko-plastisches Schädigungsmodell notwendig. Der Einfluss des Porenwassers auf das mechanische Verhalten sollte nicht vernachlässigt werden.

3.3 Stoffmodell-Klassen/Kategorien

Es gibt eine Vielzahl von Stoffmodellen für unterschiedliche Fragestellungen, Materialien, Einsatzgebiete und Deformationsmechanismen. Vorhandene Stoffmodelle wurden durch verschiedene Autoren mit der Zeit weiterentwickelt. So gibt es eine Vielzahl an Variationen und Schreibweisen. Die vielen verschiedenen Stoffmodelle und Ansätze können nicht im Detail hier beschrieben werden. Zur vertiefenden Recherche wird auf die jeweiligen Publikationen verwiesen.

Wie in Kap. 3.1 erläutert, können Stoffmodelle grob in elastische (Abb. 3.5) und (elasto)plastische Ansätze (Abb. 3.6) unterschieden werden. Für beide Mechanismen können zeitabhängige (viskose) Ansätze berücksichtigt werden.



Abb. 3.5 Unterteilung der elastischen Stoffmodelle



Abb. 3.6 Unterteilung der (elasto)plastischen Stoffmodelle

Zur besseren Veranschaulichung der verschiedenen Mechanismen eines Stoffmodells eignet sich die Darstellung in "rheologischen" Komponenten. Vereinfacht kann so ein eindimensionales elasto-plastisch-viskoses Materialverhalten (additiver Ansatz vorausgesetzt), wie in Abb. 3.7 schematisch dargestellt werden. Die wesentlichen Komponenten sind dabei eine Feder (Hook-Element, Abb. 3.7 a), ein Stoßdämpfer (Newton-Element, Abb. 3.7 b) und ein gleitendes Reibelement (St. Vernant-Element, Abb. 3.7 c). Diese Komponenten können in Reihe oder Parallel geschaltet sein. Je nach Anordnung ergeben sich verschiede Materialmodelle.



Abb. 3.7 Elemente, die in eindimensionalen visko-elasto-plastischen Modellen verwendet werden. a) Stoßdämpfer, b) Feder, c) Gleitelement verändert nach /WIK 17b/

Die Abb. 3.8 zeigt ein schematisches Modellbeispiel, in dem die einzelnen Elemente zusammengesetzt wurden. Das Modell ist aus einem visko-elastischen Kelvin-Voigt und einem visko-plastischen Bingham-Element zusammengesetzt, die in Reihe geschaltet sind (aus /FAH 15/, siehe auch Abb. 3.15). Hier wird nochmal die Addition der einzelnen Elemente zu einem Stoffmodell verdeutlicht (siehe Gleichung (3.1)). Es werden Grenzwerte angenommen, um die elastische Verformung ε^{el} vom viskoelastischen ε^{ve} und visko-plastischen ε^{vp} Modell zu trennen.



Abb. 3.8 Rheologisches Modell mit den zugehörigen charakteristischen Parametern G = elastisches Schermodul, B = Kompressionsmodul, η = Viskositätskoeffizient, c = Kohesion, Φ = innerer Reibungswinkel, ψ = Dilatationswinkel /FAH 15/

Im den folgenden Kapiteln wird eine Übersicht über elastische und elasto-plastischviskose Stoffmodelle gegeben.

3.3.1 Elastische Stoffmodelle

Ein Material ist linear-, ideal-elastisch, wenn der Spannungs-Dehnungsverlauf bei Beund Entlastung identisch ist. Die lineare Spannungs-Dehnungs-Beziehung homogen isotroper Materialien kann durch das Hookesche Gesetz (Gleichung (3.2)) beschrieben werden. Als Eingabegrößen werden das Elastizitätsmodul und die Querdehnungszahl (Poisson-Zahl) bzw. Schubmodul und Kompressionsmodul benötigt. Bei einem geschichteten Material (anisotropes Gesteinsgefüge) benötigt das Hookesche Gesetz fünf voneinander unabhängige Stoffkonstanten /KOL 11/.

$$\sigma_a = \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_a \tag{3.2}$$

 σ_a einaxiale Spannung

E E-Modul

 ϵ_a axiale Verformung

Die Querkontraktionszahl (Gleichung (3.3)), beschreibt das Verhältnis zwischen axialer Verformung und der Querdehnung:

$$-v = \frac{\varepsilon_r}{\varepsilon_a} \tag{3.3}$$

vPoisson-Zahl ε_r Querdehnung

 ϵ_a axiale Verformung

Elastische Stoffmodelle müssen nicht unbedingt ideal und/oder linear, sondern können auch nichtlinear sein. Dann ist der Spannungs-Dehnungsverlauf bei Be- und Entlastung unterschiedlich bzw. nichtlinear und das Material ist visko-elastisch /WIK 17a/.

Die Abb. 3.9 zeigt beispielhaft die Spannungs-Dehnungsverläufe der elastischen Stoffmodelle und zum Vergleich einen plastischen Fall (Abb. 3.9 c).



Abb. 3.9 a) elastisch, b) ideal elastisch, c) plastisch, d) ideal linear elastisch /WIK 17a/

3.3.2 Elastisch-plastische Stoffmodelle

Der Übergang vom elastischen zum plastischen Verhalten wird durch eine s. g. Grenzbedingung und Fließregel definiert. Die Grenzbedingung definiert einen zulässigen Bereich im Zustandsraum, der die zulässigen Spannungen begrenzt /NIE 17/. Beanspruchungen oberhalb der Grenzbedingung führen zu elasto-plastischen Deformationen. Die Grenzbedingung wird in der Regel durch den Reibungswinkel (siehe Glossar) und die Kohäsion definiert /DGGT 14/.

Durch die Fließregel wird die Richtung und durch die Konsistenzbedingungen der Betrag der plastischen Dehnung festgelegt. Die Fließregel wird aus einem plastischen Potenzial abgeleitet und ermöglicht die Berücksichtigung sowohl von Dilatanz als auch von Kontraktanz infolge von Scherbeanspruchungen. Die Art der Volumenänderung wird meistens durch den Dilatanzwinkel beschrieben /DGGT 14/. Wenn sich das Material idealplastisch verhält, verändert sich die Fließbedingung bei mehrmaliger Be- und Entlastung nicht. Bei einer Ver- und Entfestigung ändert sich die Fließregel. Nach /WRI 01/ muss die Fließbedingung in der Lage sein zwei unterschiedliche Phänomene zu beschreiben. Zum einen die Aufweitung des zulässigen elastischen Bereiches (isotrope Verfestigung) und zum anderen eine Verschiebung des zulässigen Bereiches (kinematische Verfestigung).

Zudem wird die Fließregel in *assoziiert* und *nicht assoziiert* unterschieden. Eine nichtassoziative Fließregel bedeutet, dass die plastische Potentialfunktion g von der Fließfunktion f verschieden ist. Wenn andererseits f und g identisch sind, wird eine assoziative Plastizität erhalten. Die assoziierte Fließregel überschätzt für Böden und Gesteine die plastische Volumenexpansion. Für diese Materialien muss eine nicht assoziative Fließregel (z. B. Tresca /TRE 64/ oder Von Mises /MIS 13/) verwendet werden.

3.3.2.1 Grenz-, Fließ-, bzw. Bruchbedingungen

Ein Bruchkriterium ist allgemein definiert als der Spannungszustand, ab dem die Bruchfestigkeit eines Festkörpers überschritten wird und er durch Bruch versagt. Es gibt eine Vielzahl von Bruch- bzw. Versagenskriterien. Im Folgenden werden ausgesuchte Kriterien näher erläutert.

3.3.2.1.1 Mohr-Coulomb

Das Mohr-Coulomb (MC) Kriterium kann für Fest- und Lockergestein angewendet werden. Nach dem MC-Bruchkriterium tritt Scherversagen ein, wenn eine maximale Schubspannung τ definiert über den Reibungswinkel φ und die Kohäsion c in Abhängigkeit von der Normalspannung σ überschritten wird /MAR 13/. Oder anders gesagt, ein Festkörper versagt, wenn die Schubspannungen (Scherspannung) aus der äußeren Belastung größer als die Festigkeitsgrenze (Scherfestigkeit) des inneren Scherwiderstandes werden. Die Fließbedingung *F* lautet nach /WIT 17/ wie folgt:

$$F = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_3) - \left[\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_3) \cdot \sin\varphi + c \cdot \cos\varphi\right] \le 0$$
(3.4)

Das MC-Kriterium ist ein linear elastisches, ideal-plastisches Stoffgesetz. Ein wesentlicher Kritikpunkt am MC-Kriterium ist, dass es den Einfluss der mittleren Hauptspannung auf die Festigkeit bei Be- und Entlastung nicht berücksichtigt /MAR 13/. Dies wird beim Drucker-Prager-Kriterium berücksichtigt. Zudem beschreibt das MC-Kriterium bei Zugbeanspruchung und bei hohen Druckspannungen das tatsächliche Festigkeitsverhalten von Gestein nur unzureichend /KAT 13a/. Im einfachen MC-Modell wird keine Verfestigung (hardening) durch Verformung angenommen.

Die Abb. 3.10 zeigt die Grenzbedingung nach Mohr-Coulomb im Hauptspannungsraum (links) und für verschiedene Grundbedingungen in der Ebene der deviatorischen Spannungen (rechts). Die Steigerung der Scherspannung bei steigender Normalspannung wird durch eine Aufweitung der Fließfläche ersichtlich. Die Darstellung der Spannungen im Hauptspannungsraum erzeugt somit eine Kegelform.



Abb. 3.10 Links ist die Grenzbedingung nach Mohr-Coulomb im Hauptspannungsraum dargestellt. Rechts ist die Ebene der deviatorischen Spannung dargestellt /NIE 17/

3.3.2.1.2 Drucker-Prager

Die Drucker-Prager Fließbedingung (DP) /DRU 52/ stellt eine Generalisierung der MC-Fließbedingung dar und kann als eine Erweiterung des von Mises Bruchkriterium angesehen werden. Der Vorteil bei diesem Kriterium ist die glatte kegelförmige und leicht differenzierbare Fließfläche. Ihre Definition lautet nach /MAR 13/:

$$F = (\sigma_1 - \sigma_3) - (\sigma_1 + \sigma_3) \cdot \sin \varphi - 2 \cdot c \cdot \cos \varphi = 0 \text{ Mit:}$$
(3.5)

$$J_1 = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 \text{ und} \tag{3.6}$$

$$J_{2} = \frac{1}{6} \left[\left(\sigma_{x} - \sigma_{y} \right)^{2} + \left(\sigma_{y} - \sigma_{z} \right)^{2} + \left(\sigma_{z} - \sigma_{x} \right)^{2} \right] + \tau_{xy}^{2} + \tau_{yz}^{2} + \tau_{zx}^{2}$$
(3.7)

Die materialabhängigen Koeffizienten α und *k* lassen sich aus dem Reibungswinkel φ und der Kohäsion *c* errechnen. Mit dem DP-Stoffmodell können nur elastische, idealplastische Verformungen abgebildet werden. Im DP-Stoffmodell hat die mittlere Hauptspannung eine festigende Wirkung. Versuche zeigen, dass sich die festigende Wirkung der mittleren Hauptspannung reduziert, wenn sich diese der maximalen Hauptspannung nähert. Dies wird durch das DP-Kriterium nicht ausreichend beschrieben /KRE 10/.

3.3.2.1.3 Hoek–Brown

Das Hoek–Brown Kriterium (HBC) /HOE 88/ kann insbesondere für klüftige Festgesteine angewendet werden. Die Einhüllende des Mohr´schen Spannungskreises im $\tau\sigma$ Diagramm wird durch eine Gerade dargestellt. Diese lineare Beziehung stimmt nicht in allen Fällen mit den Ergebnissen dreiaxialer Druckversuche überein. Dies ist bedingt durch unterschiedliche Bruchmechanismen bei unterschiedlichen Beanspruchungen (Sprödbruch, Scherbruch, quasi-duktiles Verhalten) /TUG 07/.

Beim empirischen HBC ist die Bruchlinie, die beim MC-Kriterium eine Gerade war, gekrümmt. Sie gibt die Verhältnisse bei dreidimensionalen Druckversuchen an Gesteinsproben besser wieder, weil es dem nichtlinearen Bruchverhalten näher kommt /WIK 17c/.

Hoek und Brown erstellten eine Grenzbedingung (Gleichung (3.8)), welche die Festigkeit des intakten Gesteins als auch für zerklüftete Gesteinsproben über den gesamten Spannungsbereich (d. h. vom Zug- bis zum hohen Druckspannungsbereich) ausreichend genau wiedergibt /WIT 17/.

$$\sigma_1 = \sigma_3 + \sigma_{Di} \left(m_b \frac{\sigma_3}{\sigma_{DI}} + s \right)^a \tag{3.8}$$

 σ_{Di} ist die einaxiale Druckfestigkeit des intakten Felses und m_b , s und a sind Materialkonstanten, die von den Verbandseigenschaften abhängen.

3.3.2.1.4 Tresca

Das Kriterium von Tresca /TRE 64/ besagt, dass bei voller Sättigung S = $V_{Wasser} = V_{Poren}$ = 1 sich eine ideal undränierte Probe beinahe volumentreu verhält. Das Bruchkriterium von Tresca beschränkt die Schubspannungen und kann für c_u -Boden (undränierte Festigkeit, Analyse mit Gesamtspannungen) verwendet werden /NIE 17/.

 $\tau_{max} \leq c_u \, oder \, \sigma_{max} - \, \sigma_{min} \, \leq 2c_u$

Die undränierte Kohäsion c_u ist eine dichte-abhängige Zustandsvariable (keine Materialkonstante).

3.3.2.1.5 Lade

Eine Anpassung des Coulomb'schen Kriteriums wurde von Lade /LAD 77/ vorgeschlagen.. Mit dem Kriterium von Lade sind die Spannungen innerhalb der Fließfläche negativ und außerhalb positiv. Die Belastungsrichtung (Tensor senkrecht zur Fließfläche) kann für jede Spannung schnell analytisch berechnet werden /NIE 17/.

3.3.2.1.6 Matsuoka and Nakai's

Das Kriterium von Matsuoka und Nakai /MAT 74/ für φ -Böden behebt eine Unstimmigkeit der Funktion von Lade mit dem Coulomb'schen Kriterium. Es stimmt sowohl für die triaxiale Kompression, als auch für die triaxiale Extension mit dem Kriterium von Coulomb (bei gleichem φ) überein.

3.3.2.1.7 Schädigungsmodel

Das Materialverhalten von Geomaterialien kann in zwei verschiedene Phänomene unterteilt werden. Das erste ist die Plastizität, die irreversible Dehnungen verursacht, die zweite ist die Schädigung, die als die Entwicklung von Mikrorissen angesehen werden kann und eine Veränderung der Materialeigenschaften zur Folge hat /KON 07/. In Schädigungsmodellen (continuum damage mechanics, CDM) kann bereits vor der eigentlichen Bruchgrenze eine Schädigung durch Mikrorisse modelliert werden.

Das Hauptziel des CDM-Ansatzes besteht darin, die Auswirkungen von verteilten Materialdefekten und deren Wachstum auf das Materialverhalten auf makroskopischer Ebene zu charakterisieren, darzustellen und zu modellieren /LEP 12/.

Innerhalb des klassischen Ansatzes (siehe zum Beispiel Lemaitre /LEM 85/) wird die Schädigung eines Materials mit einer Schadensvariable ω berücksichtigt:

$$\omega = \frac{S_D}{S} \tag{3.9}$$

- *ω* Schädigungsvariable
- S_D Schädigungsspur
- S axiale Verformung
Für ein unbeschädigtes Material ist die Variable S = 0 mit $\omega = 0$. Wenn sich Materialdefekte akkumulieren, kann ω von 0 auf einen kritischen Wert ansteigen, der oft in der Literatur als 1 angenommen wird, was einem vollständig beschädigten Material entspricht (effektive Fläche $S - S_D$ reduziert sich auf 0) /KON 07/.

Mit der Implementierung einer Schädigungsvariable können in hydromechanischen Stoffmodellen Materialeigenschaften (z. B. der Permeabilität) in Abhängigkeit der Schädigung gesetzt werden, da die plastische Verformung keinen Anhaltspunkt für die eigentliche Schädigung eines Materiales gibt.

3.3.2.2 Elastisch-plastische Stoffmodelle mit isotroper Verfestigung

Plastische Dehnungen, die bereits vor dem Erreichen der Bruchbedingung im Material auftreten, können z. B. durch das Cam-Clay oder Hardening-Soil Modell berücksichtigt werden /DGGT 14/. Wobei im klassischen Cam-Clay und Modified Cam-Clay Model nicht die Materialverfestigung aufgrund einer Verformung berücksichtigt wird. Dieser Prozess wird in den Hardening-Soil Modellen berücksichtigt.

Cam-Clay Model

Das Cam-Clay /ROS 58/ und das Modified Cam-Clay /ROS 68/ Modell wurden an der Cambridge Universität entwickelt. Die Cam-Clay Modelle sind geeignet zur Beschreibung von weichen, normal konsolidierten bis leicht überkonsolidierten Böden, bei denen die Steifigkeit proportional zum mittleren Druck zunimmt. In der Regel wird für das Cam-Clay Modell die Grenzbedingung nach Drucker-Prager angewendet, dies kann jedoch zur Überschätzung des Scherwiderstandes führen /DGGT 14/. Kennzeichnend für das Cam-Clay Modell ist die "Critical State Line", welche den elastischen und plastischen Bereich trennt /SCH 17/. Wenn ein kritischer Zustand (critical state) erreicht ist, treten unbegrenzte Verformungen ohne Änderungen der effektiven Spannung oder des Volumens auf.

Das originale Cam-Clay Modell basiert auf der Annahme, dass das Material isotrop, elasto-plastisch ist, sich als Kontinuum verformt und nicht durch Kriechen beeinflusst wird. Der Unterschied zwischen dem Cam-Clay und dem Modified Cam-Clay (MCC) ist, dass die Bruchfläche des MCC nicht durch eine konvex gekrümmte Fließkurve, sondern durch eine Ellipse beschrieben wird und deshalb der Vektor der plastischen Dehnung (senkrecht zur Bruchfläche) mit dem größten Wert der mittleren effektiven Spannung horizontal ist. Die Größe der Ellipse wird durch die Vorbelastung p'_c vorgegeben (Abb. 3.11) /SCH 17/. Die Vorbelastung kann zudem durch die Angabe des Überkonsolidierungsgrades (OCR) angegeben werden. Dies ist das Verhältnis zwischen der maximalen Vorbelastung (Hauptspannung) in der Historie, zur aktuellen Spannung.

Im MCC-Model findet keine inkrementelle abweichende plastische Dehnung für eine Änderung der mittleren effektiven Spannung statt. Dies ist für numerische Modellierungen, insbesondere für die numerische Stabilität bei Finite-Elemente-Analysen, sehr zweckmäßig (da eine Kurve kontinuierlich sein muss, um differenzierbar zu sein).

Das MCC-Model ist folgendermaßen charakterisiert /BAR 10/:

- Das Stoffmodell beschreibt die druckabhängige Materialfestigkeit und die Volumenänderung (Kontraktion und Dilatation) von tonigem Material während der Scherung bis ein kritischer Zustand erreicht wird (CSL - Critical State Line Abb. 3.11).
- Die Formulierung des modifizierten Cam-Clay-Modells basiert auf einer plastischen Theorie, die es ermöglicht, die Volumenänderung aufgrund verschiedener Belastungsarten mit einer zugehörigen Fließregel vorherzusagen
- Bei Überschreiten der Fließbedingung befindet sich der Spannungszustand auf einer Fließfläche. Die Größe der Fließfläche ändert sich mit fortschreitender plastischer Dehnung (Aufweiten der Fließfläche). Dieses Verhalten wird als Verfestigung bezeichnet (Abb. 3.11 b und c).

Das Modified Cam-Clay Model setzt die Deviatorspannung q, die mittlere effektive Spannung p' und das spezifische Volumen ε in Zusammenhang (Abb. 3.11) /SCH 17/.

- λ Steigung der normalen Konsolidierungslinie und der Critical State Linie im $v \ln p'$ Raum
- K Steigung der Quelllinie im $v \ln p'$ Raum
- M die Steigung der Critical State Linie im q p' Raum
- Γ das spezifische Volumen der Critical State Linie bei Einheitsdruck
- µ das Poisson's Verhältnis (Querkontraktionszahl) oder G das Schermodul



Abb. 3.11 Das modifizierte Cam-Clay-Modell a) Darstellung in p' - q – Ebene b, c) Kompressions- bzw. Verfestigungsverhalten im natürlichen bzw. halblogarithmischen Maßstab /SCH 17/

CSL = Critical State Line, NCL = Erstbelastung, SL = Ent- und Wiederbelastung

Hvorslev-Fläche

Nach /AZI 00/ eignet sich die critical-state Theorie am besten für feuchte, normal bis leicht überkonsolidierte Tone. Stark überkonsolidierte Tone (z. B. Opalinuston in der Schweiz) werden durch ein sprödes Verhalten charakterisiert und ihre Zustände befinden sich auf der "trockenen" Seite der kritischen Zustandslinie. Diese Art von Tonen bzw. dessen Scherverhalten kann durch das Hvorslev-Kriterium abgebildet werden.

Die Hvorslev-Fläche charakterisiert das Bruchkriterium eines Materials im überkonsolidierten Zustand unter Scherbelastung. Das Hvorslev-Kriterium (Gleichung (3.10) beschreibt das Scherverhalten, indem die Deviatorspannung bei Scherversagen q_f in einen von der mittleren Effektivspannung unabhängigen Anteil ("scheinbare Kohäsion") und in einen "reibungskontrollierten" Anteil *h* separiert werden kann /MAR 14/.

$$\frac{q_f}{p'_e} = g + h \frac{p'}{p'_e}$$
(3.10)

mit

$$p'_{e} = exp\left[\frac{\Gamma + (\lambda - \kappa)\ln 2 - \nu}{\lambda}\right] \text{ und}$$
(3.11)

$$g = (M - h) \cdot exp\left[\frac{(\kappa - \lambda) \ln 2}{\lambda}\right]$$
(3.12)

Der Parameter p'_e entspricht der äquivalenten Hvorslev-Spannung. Dies ist die mittlere Effektivspannung auf der Erstbelastungskurve bei vorgegebener Porenzahl e. Die Parameter *M* (Steigung der CSL), Γ (spezifisches Volumen der CSL bei Einheitsdruck) und *h* sind Materialkonstanten, welche durch Laborversuche ermittelt werden können. Der Parameter ν entspricht dem spezifischen Volumen. Der Parameter κ repräsentiert die Steigung der Entlastungs-/Wiederbelastungskurve und der Parameter λ die Steigung der Erstbelastungskurve /MAR 14/, /AZI 00/.

Roscoe-Fläche

Die plastische Verformung eines Tonsteines im normal konsolidierten Zustand, kann durch die Roscoe-Fläche beschrieben werden. Die Fläche definiert die Fließgrenze und kann in der p' - q Ebene durch folgende Bestimmungsgleichung beschrieben werden /MAR 14/:

$$\frac{p'}{p_0} = \frac{M^2}{M^2 + \eta^2} \text{ mit } \eta = \frac{q}{p'}$$
(3.13)

Die charakteristischen Parameter der Gleichung werden durch einaxiale Kompressionsversuche bestimmt bzw. hergeleitet. Der Parameter p_0 ist die maximale Effektivspannung bei isostatischer Belastung und kann aus der Erstbelastungskurve des Materials abgeleitet werden /MAR 14/.

Hardening-Soil

Im Hardening-Soil Modell wird das nichtlinear elastische Verhalten, von zwei Fließflächen allseitig umschlossen. Im Hauptspannungsraum haben diese beiden Fließflächen die Form einer Kappe und die eines Kegels. Der Bereich zulässiger Spannungen wird durch die Grenzbedingung nach Mohr-Coulomb definiert. Wenn die Spannungen eine der Fließflächen erreichen, gehen die elastischen in plastische Verformungen über. Bei Erreichen des Kegels finden plastische Scherverformungen und bei Erreichen der Kappe plastische Volumenänderungen statt. Durch die Verfestigung (hardening) weiten sich die jeweiligen Fließflächen auf. Das Steifigkeitsverhalten ist immer spannungsabhängig, sowie abhängig von der Erst- bzw. Ent- und Wiederbelastung /WOL 04/.

Obwohl das Hardining-Soil Modell als fortgeschrittenes Bodenmodell angesehen werden kann, gibt es eine Reihe von Merkmalen des realen Bodenverhaltens, die das Modell nicht enthält. Ein "softening" des Materials aufgrund von Dilatanz und Auflockerungseffekten wird nicht berücksichtigt. Tatsächlich ist es ein isotropes Modell, dass weder zyklische Belastungen noch eine zyklische Mobilität modelliert. Außerdem unterscheidet das Modell nicht zwischen großer Steifigkeit bei kleinen Dehnungen /PLA 17/.

3.3.2.3 Anisotrope elasto-plastische Stoffmodelle

Anisotrope elasto-plastische Stoffmodelle sind z. B. multilaminare Stoffmodelle bei denen das Materialverhalten durch die Entwicklung plastischer Dehnungen auf vorgegebenen, beliebig orientierten Kontaktflächenscharen bestimmt wird /DGGT 14/.

Ein Beispiel wäre das "Ubiquitous joint" Model. Dieses Model stellt eine Erweiterung des Stoffmodells mit Mohr-Coulomb Fließkriterium dar. Es erlaubt die Simulation einer Kluft- bzw. Trennflächenschar mit abweichenden Festigkeitskennwerten zur Gesteinsmatrix. Das Stoffmodell ermöglicht zwar die Darstellung eines anisotropen Materialverhaltens, setzt jedoch die Homogenität des betrachteten Materials voraus. Das Model basiert auf der Annahme getrennter Bruchflächen für die Materialmatrix sowie für die eigentlichen Trennflächenschar (für weitere Informationen siehe /SCH 09/). Die Abb. 3.12 zeigt beispielhaft einen Probenkörper mit orientierten Trennflächen. Für die Matrix und die Trennfläche (ubiquitous joint) sind die charakteristischen Eingabeparameter angegeben.



Abb. 3.12 Zonenbasierte Matrix und Ubiquitous-Joint-Eigenschaften (modifiziert nach /SAI 08/ zitiert in /SAI 17/)

Nach Hoek und Brown /HOE 80/ und /BRA 04/ (zitiert in /SAI 17/) ist die analytische Lösung zu stark vereinfacht und das natürliche Verhalten von anisotropen Gesteinen, welche mit zunehmenden β –Winkeln eine kontinuierliche Festigkeitsvariation aufweisen, wird nur unzureichend abgebildet. In der Realität streut die Orientierungsrichtung der Schwächeebenen. Triaxiale Laboruntersuchungen zeigten, dass sich die Festigkeit kontinuierlich mit der durchschnittlichen Orientierung der Schwächeebene ändert /SAI 17/ (Abb. 3.13).



Abb. 3.13 a) eine analytische Lösung von /JAE 60/ für die Wirkung einer einzigen gemeinsamen Schwächeebene b) Vergleich der einaxialen Druckfestigkeitswerte - Ubiquitous-Joint-Modell versus analytische Lösung c) Typische Festigkeits-Anisotropie-Kurven für Proben mit Einzel-, einem Satz und zwei Diskontinuitäten (/AL- 98/ modifiziert nach /HOE 80/, zitiert in /SAI 17/)

3.3.2.4 Hypoplastische Stoffmodelle

Bei diesen Stoffmodellen wird nicht zwischen elastischer und plastischer Dehnung unterschieden. Die Annahmen für eine Fließfläche, Fließregel und ein Verfestigungsgesetz entfallen. Für verschiedene Belastungsrichtungen können anisotrope spannungsund dichteabhängige Materialsteifigkeiten simuliert werden. Die wichtigsten Zustandsgrößen sind die Spannung und die Porenzahl /DGGT 14/. Die Materialmodelle stellen grundsätzlich eine Beziehung zwischen der Dehnungsrate und der Spannungsrate her.

Niemunis und Herle /NIE 97/ erweiterten das hypoplastische Modell von Wolffersdorf /WOL 96/ um die intergranulare Dehnung. Die Erweiterung berücksichtigt neben den Verformungen des Korngerüstes auch die Verformungen in den Kontaktbereichen der einzelnen Körner. Das Stoffmodell eignet sich besonders für nichtbindige Böden, da es ein nichtlineares und inelastisches Verhalten realitätsnah wiedergibt. Nach /GRA 13/ berücksichtigt das Modell: *"typische Eigenschaften wie Pyknotropie, Barotropie, Kontraktanz, Dilatanz, unterschiedliche Steifigkeiten bei Be,- Ent- und Wiederbelastung sowie erhöhte Steifigkeiten im Bereich kleiner Dehnungen."*

Hypoplastische Materialmodelle sind geeignet für kohäsionslose granulare Böden /NIE 97/ und sind deshalb wahrscheinlich nicht geeignet um das Materialverhalten von Opalinus- und COx-Tonstein zu modellieren.

3.3.3 Zeitabhängige Stoffmodelle

3.3.3.1 Einführung

Generell kann das Bruchverhalten von Festgesteinen in spröd und duktil unterschieden werden. Das duktile (viskos-plastische) Materialverhalten wird als viskos bezeichnet, wenn die Deformation zeitabhängig bzw. von der Belastungsgeschwindigkeit abhängig ist. Viskosität ist eine Bezeichnung aus der Fluiddynamik. Sie gibt den Scherwiderstand eines Fluids an, der zu einer Materialbewegung führt. /WIT 17/.

Zeitabhängige (viskose) Effekte werden durch ratenunabhängige Stoffmodelle nicht berücksichtigt. Hier erfolgt auf eine Belastungsänderung eine simultane Deformation, welche sich mit der Zeit nicht ändert (keine zeitliche Änderung z. B. der Deformationsraten). Dies ist eine Idealisierung, welche in der Regel nicht der Realität entspricht /WIT 17/. Der wesentliche Unterschied zwischen raten-unabhängigen plastischen und visko-plastischen Materialmodellen besteht darin, dass visko-plastische Modelle nach dem Aufbringen einer Last nicht nur bleibende Verformungen aufweisen, sondern unter dem Einfluss der aufgebrachten Belastung auch eine zeitabhängige Verformung erfahren. Zeitabhängige Effekte wie Kriechen (zeitliche Änderung der Dehnung bei konstanter Spannung), Relaxation (zeitliches Abfallen der Spannung bei verschwindender Verformung) und die Geschwindigkeitsabhängigkeit des Spannungsverlaufes können auf verschiedene Art als Erweiterungen von elasto-plastischen Modellen berücksichtigt werden /DGGT 14/.

Von /DES 17/ wird hervorgehoben, dass die mikrostrukturellen Verformungsmechanismen in Tonsteinen, insbesondere bei geringer Dehnung, wenig verstanden sind. Es gibt eine Vielzahl an möglicher Kriechmechanismen, welche während des Kriechprozesses stattfinden können, wie z. B.: Intra- und interkristalline Rissbildung, Korngrenzenverschiebung, Kornrotation und granulare Verformung, Plastizität von Schichtsilikaten und die wenig bekannte Plastizität von Nanoton-Aggregaten. Diese Mechanismen sind stark abhängig von tongebundenem Wasser, Zementation, Bruchversiegelung und Lösungsfällung /DES 17/. Die Prozesse, welche das Kriechverhalten beeinflussen können, sind:

- Tonmineralogie, COx ist z. B. spröder mit zunehmendem Calcitgehalt und duktiler mit zunehmendem Tongehalt /DES 17/.
- Interpartikel-Wasserfilme und damit der Wassergehalt haben eine dominierende Rolle bei der Verformung von Tonsteinen.
- Verzögerter (Poren)Druckausgleich aufgrund der sehr geringen Durchlässigkeit von Tonsteinen.
- Spannungs-induzierter Lösungsübergang (Drucklösung), weil die Tonsteine eine relativ hohe Menge an Carbonaten enthalten.

Weitere Mechanismen die das viskose Materialverhalten beeinflussen, sind eine Verfestigung (Dehnungsverfestigungsansatz) aufgrund der Kriechverformung und eine damit einhergehende Verlangsamung der Kriechrate. Umgekehrt kann eine Schädigung des Materialgefüges (Schädigungsansatz) aufgrund der Kriechverformung eine Erhöhung der Kriechrate verursachen. Nach /KOL 11/ können wesentliche Merkmale des Kriechens aus experimentellen Befunden abgeleitet werden:

- Bei einer deviatorischen Verformung nimmt die Kriechrate ἐ mit der Deviatorspannung σ zu, d. h. ἐ ∼ σⁿ.
- Die Kriechrate wächst mit der Temperatur. Für diesen Prozess wird häufig die Arrhenius-Beziehung verwendet: *ἐ* ~ exp(−*Q*/*RT*). *Q* und *R* sind Konstanten und *T* ist die absolute Temperatur.

Grundsätzlich lässt sich der zeitliche Verlauf der Verformung unter konstantem Spannungszustand (Abb. 3.14) in drei unterschiedliche Phasen einteilen (/HEL 11/, /PRI 64/, /KRE 10/).

3.3.3.2 Kriechphasen

Die Verformung von Tonstein kann in verschieden Kriechphasen unterteilt werden (Abb. 3.14)

Phase I (Abb. 3.14): Zum Zeitpunkt T_0 wird eine konstante einaxiale Spannung σ_a auf den Prüfkörper aufgebracht. Zwischen dem Punkt O und B findet elasto-plastische Dehnung statt. Zwischen dem Punkt A und B beginnt die Phase des primären Kriechens. Sie ist charakterisiert durch eine transiente Abnahme der Kriechrate mit der Zeit (Dehnungsverfestigung). Wird der Probenkörper zum Zeitpunkt T_1 entlastet, kehrt der Probenkörper theoretisch vollständig in seine Ausgangsform zurück. Im Gegensatz zu den anderen Phasen ist die Dehnungsrate in der primären Kriechphase höher, diese nimmt mit zunehmender Zeit und Dehnung ab (Verfestigung). Die Dehnungsrate verringert sich auf ein Minimum und wird nahezu konstant, wenn die sekundäre Phase beginnt. Die als primäre Konsolidierung bezeichnete Deformationsphase wird unter anderem durch das Auspressen von Porenwasser induziert.

Phase II (Abb. 3.14): Ab dem Punkt B wechselt die Dehnung in die Phase des sekundären Kriechens. Die Kriechrate ist in dieser Phase konstant. Es stellt sich ein Gleichgewicht zwischen Ver- und Entfestigung ein. Die Kriechrate ist nun insbesondere von der aufgebrachten Last und der Temperatur abhängig. Die Spannungsabhängigkeit dieser Rate hängt vom Kriechmechanismus ab. Die Mikrostruktur ist in diesem Stadium invariant, was bedeutet, dass Erholungseffekte mit Deformation einhergehen. Während der ersten zwei Phasen des Kriechens nimmt die Festigkeit nicht ab. Entlastet man die Probe am Punkt T_2 , erfolgt keine komplette Rückdehnung in ihren Ausgangszustand.

Phase III (Abb. 3.14): In der tertiären Deformationsphase wird der maximale Dehnungszustand erreicht. Die Dehnungsrate nimmt exponentiell mit der Spannung zu. Die Festigkeit geht in dieser Phase schnell verloren, während die Form des Materials dauerhaft verändert wird. Mit fortschreitender Zeit steigt die Kriechrate und der Probenkörper versagt. Im Gegensatz zum primären und sekundären Kriechen ist das tertiäre Kriechen kaum durch Modelle zu beschreiben.



Abb. 3.14 Allgemeine Kriechkurve nach /PRI 64/ verändert durch /HEL 11/

Für geomechanische Langzeitsicherheitsanalysen ist vor allem die zweite Kriechphase interessant. Das sekundäre- oder stationäre Kriechen ist für viele Anwendungen die wichtigste Phase. Nach einer relativ kurzen Übergangphase (Phase I) verformt sich das Material derart, dass von einem ungefähren Gleichgewicht zwischen Festigungund Entfestigungsprozessen ausgegangen werden kann (Phase II). Dieses Gleichgewicht existiert für lange Zeiträume und das Langzeitverhalten kann unter der Annahme stationärer Kriechprozesse angenommen werden /NAU 07/.

3.3.3.3 Modellansätze

Erste Ansätze zur Berücksichtigung eines viskosen Materialverhaltens basierten auf rheologischen Modellen. Sie enthalten Grundelemente wie Feder (Hooke), Gleitelemente (St. Vernant) und Dämpfer (Newton). Diese Grundelemente können in Modellen in Serie oder parallel zusammengesetzt werden, um das elasto-visko-plastische Materialverhalten abzubilden (Abb. 3.15). Eine Schaltung aus allen drei Elementen wird auch Bingham-Hooke-Modell genannt. Erst bei Erreichen der Grenzbedingung $|\sigma| \leq \sigma_{max}$ (St.-Vernant Element) tritt visko-plastisches Fließen auf /WIT 17/.



Abb. 3.15 a) Maxwell-Modell (serielle Schaltung), b) Kelvin-Voigt Körper (parallele Schaltung), c) Bingham-Hooke Modell (Dämpfungselement wird erst bei $|\sigma| > \sigma_{max}$ aktiviert /NIE 17/

Das Kelvin-Vogt Modell verbindet parallel ein Dämpfungselement (Newton'sche Flüssigkeit und eine elastische Feder (Hooke Modell). Nach /LUX 84/ zitiert in /HOU 02/ ist der Zeitverfestigungsansatz nach dem Kelvin-Modell ungeeignet für eine stufenweise Belastungserhöhung und kann das Rückwärtskriechen bei einer Belastungsreduzierung grundsätzlich nicht beschreiben. Das Maxwell'sche Modell setzt eine serielle Schaltung der Newton'schen Flüssigkeit und der Hooke'schen Feder voraus. Beide Ansätze können in dem s. g. Burgers-Modell kombiniert werden. Nach /HOU 02/ wird dieser Ansatz aufgrund der oben erwähnten Tatsache nicht angewendet.

Nach dem Modell von Bingham setzt viskoses Fließen ein, wenn die Schubspannung einen bestimmten Grenzwert (Fließgrenze) überschreitet. Die Verformung wird durch das St.-Venant Element blockiert. Das durch ein Bingham-Hooke-Modell modellierte Materialverhalten, zeigt gewisse Unterschiede zum realen Materialverhalten. Dies liegt zum einen an der Annahme eines linearen Zusammenhangs zwischen Spannung und Deformation des Hooke- und Newton Elementes. In der Realität sind diese Prozesse häufig nichtlinear, was an der Dilatanz und Strukturviskosität (Viskosität hängt von der Deformationsgeschwindigkeit ab) liegt. Schließlich hängt das Deformationsverhalten auch von äußeren Einflüssen, vor allem der Temperatur, ab. Eine Abhängigkeit der rheologischen Eigenschaften von Tonstein von der Temperatur, wurde u. a. von Zhang /ZHA 07/, /ZHA 13/ sowohl bei einaxialen als auch triaxialen Kriechversuchen beobachtet.

Grundsätzlich kann die Gesamtverformung in einen elastischen und einen plastischen Anteil unterteilt werden $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_{el} + \dot{\varepsilon}_{vp}$. $\dot{\varepsilon}_{el}$ ist die elastische Dehnung und $\dot{\varepsilon}_{vp}$ ist die visko-plastische Dehnung. Das elastische Modell wurde bereits in Kap. 3.3.1 beschrieben. Es gibt verschiedene Ansätze, das (visko-plastische) Kriechverhalten von Tonsteinen mathematisch zu beschreiben. Die einfachste Möglichkeit der numerischen Implementierung des Kriechverhaltens, ist der von Norton /NOR 29/, aus Untersuchungen zur sekundären Kriechphase entwickelte, rein spannungsabhängige Ansatz. Grundsätzlich beschreibt dieses eindimensionale Stoßdämpfermodell die minimale Kriechgeschwindigkeit als Potenzfunktion der Spannung (Gleichung (3.14)).

$$\dot{\varepsilon} = \mathbf{A} \cdot \sigma_{dev}^n \tag{3.14}$$

Ė	Kriechrate	
А	Kriechfaktor in 1/s	
n	Kriechexponent	
σ_{dev}	Deviatorspannung	

Eine weitere Variante, basierend auf dem Norton-Ansatz, wird von /KRE 10/ beschrieben. Hier wird der Arrhenius-Term, also eine Temperaturabhängigkeit eingeführt.

$$\dot{\varepsilon} = A e^{-\frac{Q}{RT}} \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^n \tag{3.15}$$

ἐ KriechrateA Kriechfaktor in 1/s

n Kriechexponent

Ein weit verbreiteter Ansatz zur Beschreibung eines visko-plastischen Materialverhaltens ist das Perzyna Modell /PER 66/. Das Perzyna Modell wurde ursprünglich für Metalle entwickelt und wurde zur Beschreibung des visko-plastischen Verhaltens von Geomaterialien angepasst.

Das Hauptmerkmal dieses Modells ist, dass die raten/zeit-unabhängige Fließgrenze, die zur Beschreibung der visko-plastischen Spannung verwendet wird, größer als Null werden kann. Dieser Effekt wird als "Überlast" bezeichnet. Zudem kann sich die Belastung mit der Zeit auf die ursprüngliche Fließgrenze zurück entspannen. Der Modellansatz von Perzyna wird unter anderem in /WIT 17/ beschrieben (Gleichung (3.16)):

$$\dot{\varepsilon}_{vp} = \gamma \langle \Phi \rangle \frac{\partial F}{\partial \sigma}$$
(3.16)

 $\dot{\varepsilon}_{vp}$ ist die viskoplastische Dehnung. *F* ist die Grenzbedingung (yield function), γ ist ein temperaturabhängiger Fluiditätsparameter und Φ ist die eigentliche Funktion zur Beschreibung des viskosen Verhaltens. Φ kann durch eine Potenzfunktion, entsprechend des Norton-Ansatzes /NOR 29/ ausgedrückt werden:

$$\Phi(F) = \left(\frac{F - F_0}{F_0}\right)^N \tag{3.17}$$

 F_0 ist eine Referenzspannung der Grenzbedingung, wie z. B. die einaxiale Druckfestigkeit und *N* ist der Verformungsratenkoeffizient, ein Maß das die Überlast darstellt, die durch den Abstand zwischen der dynamischen Versagensoberfläche und der statischen Dehnungsoberfläche verursacht wird /WIT 17/. Die Parameter γ und *N* werden aus Labor-Kriechversuchen bestimmt.

3.3.3.4 Projektbeispiele zu viskosen Stoffmodellen

Im Folgenden sind beispielhaft Projekte bzw. Modelle beschrieben, in denen das viskoplastische Materialverhalten berücksichtigt wird:

THM-TON-Projekt

Im Rahmen des THM-TON-Projekts wurden in den letzten zehn Jahren von 2007 bis 2016 Untersuchungen zu thermo-hydromechanischen Eigenschaften und Reaktionen von Tonsteinen und tonbasierten Versatz-/Dichtungsmaterialien durchgeführt. Die im ersten Zeitraum von 2007 bis 2013 gewonnenen Ergebnisse sind im GRS-Bericht "Thermo-hydromechanische Prozesse im Nahfeld um ein HLW-Endlager in tonigen Formationen" zusammengefasst /ZHA 13/. Im Anschluss daran folgte das europäische Projekt "DOPAS" (Full-Scale Demonstration of Plugs and Seal, Laufzeit 2012 bis August 2016) zur sicheren Versiegelung von Endlagern in verschiedenen geologischen Formationen (Ton, kristallin und Salz). Als Teil des GRS-Programms im Rahmen des DOPAS-Projekts wurden die Selbstabdichtungseigenschaften beschädigter Tonsteine und die Dichtungseigenschaften von Dichtungsmaterialien auf Tonbasis experimentell untersucht. Die experimentellen Ergebnisse wurden hinsichtlich der Modellvorhersage der Langzeitversiegelung eines Streckendichtungssystems ausgewertet. Die wichtigsten Ergebnisse und Schlussfolgerungen aus den GRS-Forschungsarbeiten innerhalb der THM-TON- und DOPAS-Projekte sind in /ZHA 17b/ zusammengefasst.

Thermo-hydromechanische Prozesse im Nahfeld um ein HLW-Endlager in lehmigen Formationen /ZHA 13/

In /ZHA 13/ wurde das Langzeit Deformationsverhalten (u. a. Kriechen) von COx- und Opalinuston Proben unter einaxialen und triaxialen Versuchsbedingungen von Zeitspannen zwischen 1 bis 7,7 Jahren untersucht. Die Kriechversuche konzentrierten sich auf Aspekte der Spannungsabhängigkeit, den Einfluss des Belastungspfades und die anisotrope Wirkung auf das Kriechen der Tonsteine mit natürlichen Wassergehalten bei Umgebungstemperatur. Folgende wichtige Schlussfolgerungen lassen sich ziehen:

- Die Tonproben kriechen bereits unter lithostatischen Spannungszuständen der Gesteinsformationen und sogar bei extrem niedrigen deviatorischen Spannungen von 0,3 bis 1,0 MPa, was darauf hinweist, dass es praktisch keine Kriechgrenze unter Laborbedingungen gibt.
- Das Kriechverhalten ist abhängig vom Belastungspfad. Das Kriechen unter erhöhter deviatorischer Beanspruchung ist durch eine vorübergehende Phase mit abnehmenden Raten gekennzeichnet, die durch die Dehnungshärtung und eine nachfolgende stationäre Phase mit einer asymptotisch konstanten Rate bestimmt werden. Unter verminderter deviatorischer Beanspruchung entwickelt sich das Kriechen umgekehrt von zuerst vorwärts bei negativen Raten, um dann in stationäres Kriechen bei positiven Raten zu wechseln.
- Bei niedrigen Spannungen unterhalb der Schadensschwelle variiert die Kriechgeschwindigkeit unwesentlich mit der Spannung. Darüber hinaus steigt die Kriechgeschwindigkeit deutlich an. Die Beschleunigung des Kriechens ist der Beginn der Mikrospalt Bildung.
- Die Verformung ist senkrecht größer als parallel zur Schichtungsebene, aufgrund der Differenz der Festigkeit. Reine Kriechverformungen und Kriechraten sind allerdings nicht abhängig von den Belastungsrichtungen, was auf einen vernachlässigbaren anisotropen Effekt auf das Kriechen hindeutet.
- Beide untersuchten Tonsteine mit durchschnittlichen Tongehalten von 40 % bis 65 %, zeigten ein ähnliches Kriechverhalten. Niedriger Tongehalt und ein hoher Karbonatgehalt verlangsamen das Kriechen.

Nach /WIT 17/ ist bei Feststoffen die Beziehung zwischen Spannung τ und Kriechgeschwindigkeit $\dot{\varepsilon}$ in der Regel nicht linear, sondern logarithmisch: $\tau = \tau_0 + c \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_{\cdot}}\right)$ bzw. $\dot{\epsilon} = a \exp(b \tau)$. Dies wurde unter anderem im folgenden Ansatz von Zhang berücksichtigt. In /ZHA 13/ wurde die Kriechbeziehung, abgeleitet von Mitchell /MIT 92/, vereinfacht (Gleichung (3.18)):

$$\dot{\varepsilon} = \frac{A}{2} \exp(-\frac{Q}{RT}) \cdot \exp(\alpha\sigma)$$
(3.18)

- έ konstante Scherkriechrate 1/s
- A Kriechfaktor in 1/s
- T absolute Temperatur (K)
- *R* universale Gaskonstante kJ/molK
- *Q* Aktivierungsenergie kJ/mol
- σ Scherspannung MPa
- α Konstante 1/MPa

Die konstitutive Gleichung wurde für das stationäre Scherkriechen von wassergesättigtem Tonstein entwickelt. Die Gleichung wurde durch die thermodynamische Analyse des Bodenfließens, unter Anwendung der absoluten Reaktionsgeschwindigkeitstheorie, abgeleitet. Die Gleichung beschreibt den Kriechprozess durch eine Überwindung einer Energiebarriere (Arrhenius-Term, Gleichung (3.15)) mit Hilfe der angelegten Spannung und der thermischen Energie.

Bei geringer Spannung in einem Bereich < 10 MPa, bei dem Diffusionsprozesse in adsorbierten Wasserfilmen zwischen festen Teilchen dominieren, ist die Kriechgeschwindigkeit linear von der Spannung abhängig mit: $\dot{\varepsilon} = A \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)(\alpha\sigma)$. Bei relativ hohen Spannungen kann die Kriechgeschwindigkeit durch eine exponentielle Gleichung ausgedrückt werden: $\dot{\varepsilon} = A/2 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \exp(\alpha\sigma)$. Die drei Kriechparameter *A*, α und *Q* wurden vorläufig aus den triaxialen Kriechversuchen am nahezu gesättigten COx-Tonstein unter erhöhten Schubspannungen bestimmt: $A = 2,5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, $\alpha = 0,2 \text{ MPa}^{-1}$ und $Q = 45 \text{ kJmol}^{-1}$. Zu beachten ist, dass für die volumetrische Kriechverformung (Konsolidierung oder Dilatanz) eine zusätzliche Gleichung formuliert werden muss, um das gesamte zeitabhängige Verformungsverhalten des Tonsteins zu modellieren.

Sealing Performance of Fractured Claystone and Clay-Based Materials /ZHA 17c/

In Zhang /ZHA 17c/, werden aktuelle Ergebnisse aus dem THM-TON und dem EC Project DOPAS zusammengefasst. Es wurde ein Modell basierend auf dem Model, welches in /ZHA 13/ verwendet wurde, weiterentwickelt. Das Modell (in Code-Bright implementiert) berücksichtigt:

- zeitabhängige Verformung von wassergesättigtem Tonstein,
- Bruchinduzierte Permeabilitätsänderungen,
- Rekompaktierungs- und Permeabilitätsänderungen von geschädigtem Tonstein und
- Gasmigrationsverhalten von geschädigtem und wieder verheiltem Tonstein.

Darüber hinaus:

- Anisotropie für den elastischen Parameter,
- Hardening und softening,
- Quellung in Abhängigkeit von der Saugspannung,
- Kriechen mit Härtung (hyperbolig und Lemaitre).

Unter anderem wird ein visko-elasto-plastisches Modell beschrieben. Das Modell ist für Tonstein in wassergesättigten und ungesättigten Bedingungen formuliert.

Zur Beschreibung der Kriechverformung von Tonstein wird ein modifiziertes Lemaitre-Gesetz unter Berücksichtigung des Verfestigungseffekts angewendet. Die Dehnungsrate wird als Funktion der deviatorischen Spannung und der äquivalenten plastischen Dehnung ausgedrückt.

$$\dot{\varepsilon}^{vp} = \frac{2}{3} \frac{\dot{\varepsilon}^{vp}_{eq}}{q} s \text{ mit } \dot{\varepsilon}^{vp} = \gamma (q - \sigma_s)^n \left(1 - \varepsilon^{vp}_{eq}\right)^m$$
(3.19)

 γ ist ein Viskositätsparameter, σ_s ist eine Schwelle der deviatorischen Spannung, ab der die visko-plastische Verformung aktiviert wird, *n* und *m* sind Materialkonstanten und ε_{ea}^{vp} ist die Zustandsvariable der viskoplastischen Reaktion, definiert als:

$$\varepsilon_{eq}^{vp} = \int_0^t \left(\frac{2}{3} \,\dot{\varepsilon}^{vp} : \dot{\varepsilon}^{vp}\right)^{\frac{1}{2}} dt \tag{3.20}$$

Der Reibungswinkel wird im zeitlichen Verlauf der Verformung angepasst (4 Zonen). Die Anpassung hängt von der äquivalenten plastischen Verformung ab (Abb. 3.16).



Abb. 3.16 Für vier Zonen werden unterschiedliche Reibungswinkel angenommen

 φ_{mov} mobilisierter Reibungswinkel, φ_{ini} anfänglicher Reibungswinkel an der Fließfläche, φ_{peak} maximaler Reibungswinkel bei maximaler Versagensfestigkeit, φ_{res} verbleibender Reibungswinkel bei Restfestigkeit, ξ_1 äquivalente plastische Dehnung bei der die maximale Festigkeit erreicht wird, ξ_2 äquivalente plastische Dehnung bei der die Entfestigung beginnt, ξ_3 äquivalente plastische Dehnung bei der die Restfestigkeit erreicht ist.

Basierend auf den Langzeit-Kriechversuchen, wurde ein Modell für das stationäre Kriechen von Tonstein durch Modifikation des Mitchell-Gesetzes /MIT 92/ formuliert. Das Mitchell-Gesetz wurde durch thermodynamische Analysen des Bodenflusses, durch Anwendung der absoluten Reaktionsgeschwindigkeits-Theorie abgeleitet. Die Erläuterung dieses Ansatzes wurde bereits im vorherigen Abschnitt der Ergebisse aus /ZHA 13/ erläutert.

Souley /SOU 17/ und Manica /MÁN 17/

Der Gleiche Ansatz (basierend auf dem Perzyna Model), wie in /ZHA 13/, wird von Souley /SOU 17/ und Manica /MÁN 17/ leicht abgewandelt verwendet. Hiermit wurde der COx Tonstein aus dem Felslabor Meuse/Haute-Marne bei Bure modelliert.

$$\dot{\varepsilon}^{vp} = A_{visc} \exp\left(-\frac{B_0}{RT}\right) \left\langle \frac{q - g(\sigma')}{\sigma_0} \right\rangle^n \left(\varepsilon_{eq}\right)^m \frac{\partial q}{\partial \sigma'}$$
(3.21)

- $\dot{\varepsilon}^{vp}$ Scherkriechrate 1/s
- Avisc Kriechfaktor in 1/s
- *T* absolute Temperatur (K)
- R universale Gaskonstante kJ/molK
- *B*₀ Aktivierungsenergie kJ/mol
- σ_0 Referenzspannung MPa
- *n* dimensionsloser Exponent, der dem deviatorischen Spannungsexponenten entspricht
- *m* Exponent der Ver-/Entfestigung

 $\varepsilon_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3}} \varepsilon^{vp}$: ε^{vp} ist die visko-plastische Dehnung (oder visko-plastische Verzerrung in Übereinstimmung mit den vernachlässigbaren Volumenspannungen, die während der Kriechversuche beobachtet werden), $g(\sigma')$ ist die Kriechschwellenfunktion in Abhängigkeit von der Lücke zwischen dem natürlichen Spannungszustand und den induzierten Zuständen für praktische Anwendungen. Die Gleichung lautet wie folgt:

$$g(\sigma') = g(p',q) = \exp\left(-\frac{\sqrt{(p'-p_0')^2 + (q-q_0)^2}}{\sigma_0}\right)$$
(3.22)

Sonstige

Von /ZHA 07/ wurde zudem unter anderem die Abhängigkeit der Kriechrate auf Temperaturänderungen untersucht. Es zeigte sich, dass eine Temperaturerhöhung die Kriechrate verlangsamen kann. Wenn die Proben auf 50 – 60 °C erhitzt wurden, verringerte sich die Dehnungsrate, was möglicherweise auf Dispersion von thermischaktiviertem Porenwasser oder verdunsten von Porenwasser zurückzuführen ist. Ein weiteres Erhitzen der Proben auf 90 °C verringerte die Kriechrate weiter. Ein ähnliches Verhalten wurde auch von /MON 12/ und /DEL 13/ beobachtet. Die Untersuchungen zeigten, dass ab Temperaturen von ca. 60 °C ein thermischer Konsolidierungsprozess einsetzte.

3.4 Beispiele für Stoffmodelle bzw. Projekte

Im Folgenden werden ausgewählte Beispiele für numerische Stoffmodelle, speziell für Tonstein gegeben. Diese Modelle sind im Wesentlichen zur Modellierung von endlagerrelevanten Prozessen entwickelt worden, wobei im Detail unterschiedliche Fragestellungen im Fokus stehen können.

3.4.1 Modellrechnungen der NAGRA Schweiz

Die folgenden Informationen wurden aus den Berichten /MAR 14/ /SHI 14/ und /MAR 16/ entnommen. Die NAGRA verwendet für ihre Modellierungen zur Langzeitsicherheit (Opalinuston) einen elasto-plastischen Modellansatz, der Elemente aus der "critical state" Theorie enthält. Dieser Ansatz ist insbesondere für normal und leicht überkonsolidierte Geomaterialien geeignet. Die Grenzzustände werden durch drei Flächen im Zustandsraum e - p' - q beschrieben, welche die möglichen Zustände elastischer Verformung eingrenzen. Es sind dies die Hvorslev-Fläche, die Roscoe-Fläche sowie die Zugspannungsbegrenzung (Abb. 3.17). Das Material kann keine Zugspannungen aufnehmen. Dies wird damit begründet, dass das Material keine echte Kohäsion (Zementation, "bonding") besitzt. Die Hvorslev-Fläche charakterisiert den Grenzzustand eines konsolidierbaren Materials im überkonsolidierten Zustand unter Scherbelastung. Die Festigkeiten bzw. die Grenzzustandsflächen sind abhängig von der Porenzahl.



Abb. 3.17 Schematische Darstellung der Grenzzustandsbedingungen eines isotropen Geomaterials im Zustandsraum e - p' - q /MAR 14/

Langzeitversuche mit Fokus auf die Sekundärkonsolidierung des Opalinustons wurden in den Langzeitsicherheitsuntersuchungen nicht durchgeführt. Auch das Kriechverhalten wird im Modellansatz nicht berücksichtigt. Folgende Modellierungen wurden nach /MAR 14/ durchgeführt (Abb. 3.18):

- Numerische Kontinuumsmodellberechnungen am rotationssymmetrischen Modell mit ABAQUS zur Analyse des hydraulisch-gekoppelten Gebirgsverhalten f
 ür das abdeckende BGM-3.
- Numerische Kontinuumsmodellberechnungen am axial-symmetrischen Modell mit ABAQUS zur Analyse des hydraulisch-gekoppelten Systemverhaltens (Gebirge-Ausbau) für das abdeckende BGM-3.
- Numerische Kontinuumsmodellberechnungen am Scheibenmodell mit FLAC zur Analyse des hydraulisch-gekoppelten reinen Gebirgsverhalten für verschiedene BGM-Typen.

Der oben beschriebene Modellansatz ist eher für das kurzzeitliche Materialverhalten in der Nachverschlussphase geeignet. Dies zeigen auch die in der Abb. 3.18 zusammengefassten Modellierungstools und deren Annahmen für die Etappe 2 des Sachplanverfahrens. Diese wurden für bau- und sicherheitstechnische Fragestellungen angewendet.

Code / Software	Abaqus (Vers. 6.11)	FLAC ^{2D} (Vers.7) FLAC ^{3D} (Vers.4)	Phase ² (Vers. 8)	Y-Geo / FEMDEM
Bezeichnung des Modellansatzes	*MOHR- COULOMB	SUBI	Composite Medium ¹	Cohesive-Zone Model ²
Referenz	Heidbach et al. (2014), Kapitel 2	Nagra (2014d)	Lanyon et al. (2014), Kapitel 5.4.3	Geomechanica (2013), Kapitel 5.3.5
Numerisches Verfahren	Finite Elemente	Finite Differenzen	Finite Elemente	Hybride Finite Diskrete Elemente
Analyse-Ansatz - Effektivspannung - Totalspannung	×	×	×	×
Elastische Moduln - Isotrop - Anisotrop	×	×	× (Matrix) × (Schichtung)	× (Matrix)
Festigkeit - Isotrop - Anisotrop	×	×	×	×
Fliess- / Bruch- bedingungen	Tresca	Mohr-Coulomb	n. a. ³	n. a. ³
Verfestigungsansatz	hardening/softening nicht aktiviert	hardening/softening aktiviert	n. a ³	n. a. ³
Hydro-mechanische Kopplung	nein	ja	nein	nein

¹ Composite Medium: zusammengesetztes Medium, bestehend aus einer homogenen isotropen Matrix und stochastisch verteilten Schicht- bzw. Trennflächen (anistrope Steifigkeit)

² Cohesive-Zone Model: zusammengesetztes Medium, bestehend aus elastischen Matrix-Elementen (homogen, anisotrop), die mittels 2-dimensionaler Bruchelemente verbunden sind

³ Nicht analysiert: in den zusammengesetzten Medien (composite medium, cohesive-zone model) wird das Verfestigungsverhalten durch das Zusammenwirken von Matrix- und Trennflächenelementen inhärent festgelegt.

Abb. 3.18 Zusammenstellung der Modellierungswerkzeuge und der berücksichtigten Mechanismen für die bau- und sicherheitstechnischen Anwendungen für die Etappe 2 des Sachplanverfahrens /MAR 14/

3.4.2 Stoffmodell Hou/Lux-T

Die folgenden Informationen wurden aus den Berichten /HOU 02/ /LUX 02/ und /CZA 11/ entnommen. Das Stoffmodell Hou/Lux-T ist eine Modifikation des Stoffmodells Hou/Lux für Salzgesteine. Nach /HOU 02/ kann das Materialverhalten für Salzgesteine grundsätzlich auf Tonsteine übertragen werden. Mit dem Stoffmodell kann das elastisch-visko-plastische Materialverhalten unter Einbeziehung von Schädigung und einer wassergehaltsabhängigen Festigkeit (Bruch- und Gefügefestigkeit) und Steifigkeit beschrieben werden. Das Stoffmodell kann nach /LUX 02/ in zwei Teilmodelle unterteilt werden:

(a) Teilmodell Hou/Lux-ODS (ohne direkte Schädigung): Dieses Teilmodell beschreibt eine volumentreue Kriechdeformation des Materials mit indirekter Schädigung bei Überschreitung der Schädigungsgrenze. Es baut auf dem Kriechmodell Lubby2 nach Lux (1984) mit Dehnungsverfestigung auf.

(b) Teilmodell Hou/Lux-MDS-T (mit direkter Schädigung): Dieses Teilmodell beschreibt ein mit zusätzlicher Schädigung verbundenes Entfestigungs- und Deformationsverhalten. Die Gefügeschädigung führt auch zu dilatantem Materialverhalten. Durch einen zusätzlichen Term zur Berücksichtigung der schädigungsbedingten Deformation wird die Kriechrate nach dem Stoffmodell Hou/Lux(ODS) verstärkt.

Im Stoffmodell kann eine Abhängigkeit der Festigkeit vom Wassergehalt durch die Einführung einer Vorfaktorfunktion f_W berücksichtigt werden. Analog kann die Abhängigkeit der Steifigkeit vom Wassergehalt berechnet werden. Damit kann die Abhängigkeit der Festigkeit und der Steifigkeit vom Wassergehalt mit zwei einfachen Funktionen sowie zwei materialabhängigen Parametern berechnet werden.

Das visko-plastische Materialverhalten (kriechen) wird im Stoffmodell Hou-Lux-T nach der folgenden Formel berechnet (Gleichung (3.23)):

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{vp} = \frac{3}{2} \left[\frac{1}{\eta_k} \left(1 - \frac{\varepsilon^{tr}}{\max \varepsilon^{tr}} \right) + \frac{1}{\eta_m} \right] \frac{s_{ij}}{1 - D}$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{vp} \quad \text{Scherkriechrate 1/s}$$
(3.23)

 η_k Materialparameter

 η_m Materialparameter

- *D* Schädigung (Schädigungsintensität, Damage)
- ε^{tr} Kriechverformung
- Sii deviatorischer Spannungstensor

Von /CZA 11/ wurde das Stoffmodell Hou/Lux-T um die Berücksichtigung von anisotropen Festigkeitseigenschaften erweitert. In diesem Zusammenhang kann eine schichtungsbezogene Schädigung simuliert werden, wodurch sich weitere Deformationen ergeben können.

3.4.3 Barcelona Basic Model

Das Barcelona Basic Model (BBM) ist ein geomechanisches konstitutives Stoffmodell, welches das elasto-plastische Verhalten teilgesättigter Materialien beschreibt. Das Modell wurde in /ALO 90/ als Erweiterung des MCC (Modified Cam-Clay) vorgestellt und kann wesentliche Merkmale des geomechanischen Verhaltens teilgesättigter Materialien beschreiben, wie z. B. sättigungsabhängiges Quellen in Abhängigkeit von der angelegten Spannung sowie die Erhöhung der Scherfestigkeit und der scheinbaren Vorkonsolidierungsspannung (preconsolidation stress) mit der Saugspannung (suction).

Im Folgenden wird ein Überblick über die wesentlichen Grundannahmen des BBM und seine Materialparameter und erfolgreiche Verifizierung des Modells anhand von Experimenten gegeben, sowie relevante Literatur aufgelistet.

Das BBM wurde zur Beschreibung des geomechanischen Verhaltens teilgesättigter leicht expansiver Bodenmaterialien entwickelt. Um generell anwendbar zu sein, ist das Modell einfach gehalten und dient nicht der quantitativ exakten Vorhersage des Verhaltens einzelner Bodenproben aus Experimenten. Vielmehr soll es durch einen allgemeinen Ansatz leicht auf spezielle Materialien erweiterbar sein /ALO 90/. Das BBM ist sowohl für isotrope als auch triaxiale Spannungszustände formuliert und ist konzeptionell eine Erweiterung des MCC für teilgesättigte Bodenmaterialien. Das Materialverhalten wird im BBM Modell durch zwei Spannungszustandsvariablen beschrieben. Zum einen durch die totale Spannung abzüglich des Luftdrucks (net stress tensor) p sowie der Saugspannung s. Hierbei ist

$$p = \sigma_m - u_q \tag{3.24}$$

mit dem Gasdruck u_g und der totalen mittleren Spannung $\sigma_m = (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)/3$, wobei σ_i den totalen Hauptspannungen entspricht. Die Saugspannung bzw. die Kapillarspannung ist als Differenz der beiden Phasendrücke im Porenraum u_g und u_w

$$s = u_a - u_w \tag{3.25}$$

definiert. Triaxiale Spannungszustände werden über die Scherspannung $q = (\sigma_1 - \sigma_3)$ im Modell beschrieben. Generell können auch andere Definitionen der Saugspannung und von q genutzt werden. Der Übergang zwischen elastischem und plastischem Materialverhalten ist über die Versagensfläche im Raum (p, q, s) beschrieben (s. a. Abb. 3.19). In der thermo-elasto-plastischen Version des BBM /GEN 95/ hängt die Versagensfläche außerdem noch von der Temperatur T ab (s. a. Abb. 3.19 links). Unterhalb der aufgespannten Fläche ist das Materialverhalten elastisch, oberhalb ist es plastisch. Für s = 0 geht die Versagensfläche in die Versagensfunktion des MCC über. Generell kann im BBM für den flüssigkeitsgesättigten Fall in Abhängigkeit vom realen System auch eine andere Versagenskurve gewählt werden. Die elastische Domäne vergrößert sich mit steigendem s, wobei die Zunahme durch die *loading-collapse* (LC) Kurve bestimmt wird, einer der zentralen Charakteristika des BBM /GEN 06/.



Abb. 3.19 Dreidimensionale Darstellung der Versagensfläche im thermo-elastoplastischen BBM (/GEN 95/)

Die inkrementellen Verformungen $d\varepsilon$ von teilgesättigten Bodenmaterialien lassen sich im BBM in elastische, plastische, thermische und kapillare Verformungen aufteilen; diese sind im Einzelnen in /RUT 11/ beschrieben. In der Literatur finden sich verschiedene Erweiterungen des BBM um dessen Gültigkeitsbereich für verschiedene Modellbereiche zu erweitern /JOS 92/, /WHE 95/, u. a. auch um Versagensflächen für anisotrop gesättigte Bodenmaterialien /CUI 95/.

Die Erweiterung des MCC auf teilgesättigte Materialien und nicht-isotherme Bedingungen erhöht die Komplexität und die Zahl der Eingabeparameter. Während für das MCC fünf Eingabeparameter notwendig sind, können für das BBM bis zu 21 Parameter notwendig sein. Diskussionen zur Frage von Bestimmung und Ungewissheit der Parameter sind in /ALO 90/, /GEN 95/ und /ÅKE 08/ zu finden.

Das BBM wurde in /ALO 90/ erfolgreich mit analytisch lösbaren Referenzfällen verglichen und dadurch verifiziert. Im Rahmen der Implementierung des BBM im Code FLAC3D als Erweiterung des dort vorhandenen MCC im Rahmen der TOUGH-FLAC Kopplung /RUT 11/, wurden diese Referenzfälle erfolgreich nachgerechnet und das BBM wurde außerdem anhand experimenteller Daten /ÅKE 08/ weiter verifiziert.

Zudem wurde das BBM Modell unter anderem im Posiva Projekt zur Modellierung von geotechnischen Barrieren angewendet /TOP 13/, /TOP 17/. Von /ZHA 07/ wurden Modellierungen mit CODE_BRIGHT und dem BBM Model durchgeführt. Sie dienten zur Nachrechnung von Laborversuchen, welche das thermische Materialverhalten von Opalinustonproben untersuchten.

3.4.4 Modell nach Souley

Das phänomenologische elastisch-visko-plastische Modell von /SOU 11/ wurde um die jüngsten Erkenntnisse zum Verständnis des mechanischen und hydromechanischen Verhaltens von COx-Tonsteinen, insbesondere der EDZ erweitert. Das alte Modell wird um den Einfluss von induzierten Materialschädigungen auf die verzögerten Dehnungen und Dehnungsraten des COx-Tonsteins und die auf der Ortsskala beobachteten Permeabilitätsänderungen erweitert. Änderungen der Permeabilität können in der EDZ und in der EdZ berücksichtigt werden. Aus physikalischer Sicht grenzt die EdZ an die EDZ und ist mit geringfügigen Änderungen der mechanischen und hydraulischen Eigenschaften verbunden. Es scheint jedoch, dass die Änderungen der hydraulischen Eiwird eine hydro-mechanische Kopplung bei gesättigten Bedingungen integriert. Dieses Modell ist in den Code FLAC3D implementiert /SOU 17/.

Für eine detaillierte Beschreibung des Modells, siehe /SOU 17/. Im Folgenden werden die im Modell berücksichtigten Prozesse zusammengefasst:

Tab. 3.1Die Abbildung zeigt eine Zusammenfassung der berücksichtigten Prozesse
in dem Stoffmodell nach Souley /SOU 17/

Prozess/Parameter	Makroskopisches Modell
Bei geringen Spannungen ist das mechanische Verhalten elastisch, linear und isotrop	Elastisch, lineare und isotrop drainiert elastische Pa- rameter
Schädigungsgrenze (Elastizi- tätsgrenze)	Elasto-plastischer Ansatz basierend auf Hoek-Brown- Parametern
Bruchgrenze (Spitzenfestig- keit)	Elasto-plastischer Ansatz basierend auf Hoek-Brown- Parametern
Residuale Festigkeit	Linear bei geringem Einschlussdruck (confining pres- sure)
Zugfestigkeit	Tension cut-off (Zugspannungsfunktion) mit der Zug- festigkeit in Abhängigkeit von den Hoek-Brown- Parametern (Schadensschwelle und -spitze)
Mikrorisse, die in der Vor- Peak-Region erzeugt werden	Elasto-plastischer Ansatz
	- Dilatanzwinkel (lineare Variation)
Nach Bruchverhalten	Elasto-plastischer Ansatz mit softening
	- Bruchfunktion ist eine Kombination aus Bruchgrenze und einer linearen Linie, gekennzeichnet durch eine progressive Abnahme der Festigkeit und einem Kohä- sionsverlust
	- Nicht assoziierte Flussregel
	- Dilatanzwinkel (lineare Variation)
Residuales Materialverhalten	Elasto-plastischer Ansatz
	- Idealplastisch
	- Nicht assoziierte Flussregel
	- Dilatanzwinkel (konstant)
Zeitabhängiges Verhalten ei- ner intakten Matrix	Lemaître-Gesetz (spezieller Fall des Overstress- konzepts vorgeschlagen von Perzyna, welches auf der Overstress-funktion auf von - Mises - Spannung und Kriechschwelle basiert)
	- Materialviskosität
	- Kriechrate steigt nichtlinear in Bezug auf der deviato- rischen Spannung (Potenzgesetz)
	 Die Kriechdehnungsrate hängt (exponentiell) von der äquivalenten visko-plastischen Dehnung ab
	 Vorhandensein einer Schwelle, unterhalb der das visko-plastische Verhalten nicht aktiviert wird, ausge- drückt als Abstand zwischen dem natürlichen Span- nungszustand und den induzierten Spannungen

Prozess/Parameter	Makroskopisches Modell
Zeitabhängiges Verhalten von geschädigtem und / oder ge- klüfteten Tonstein	Aufgrund umfangreicher Feldversuche werden die Änderungen der visko-plastischen Dehnungsraten und -größen aufgrund von Schädigung und Bruchausdeh- nung berücksichtigt, indem die Verfestigung in Ab- hängigkeit von der momentanen Schädigung (in Be- zug auf plastische Verformungen) und der Kriechaktivierungsenergie variiert wird als eine Funk- tion der Bruchrate
Hydromechanische Kopplung unter gesättigten Bedingungen	Als Teil von Biots-Theorie und unter der Annahme, dass die Versuche an gesättigten (oder fast gesättig- ten) Proben, unter drainierten Bedingungen, durchge- führt werden

In dem Modell kann keine Richtungsabhängigkeit (Anisotropie) berücksichtigt werden. Versuche zeigen, dass der isotrope Modellansatz nicht in der Lage ist, das anisotrope Verhalten des in situ beobachteten COx-Tonsteins zu reproduzieren. Nach /SOU 17/ ist es erforderlich, eine strukturelle Anisotropie (mechanisch und hydraulisch) zu berücksichtigen, um eine anisotrope induzierte Plastizität um Strecken herum erzeugen zu können. Zudem kann in dem Modell keine Verheilung aufgrund einer Konsolidierung, das Quellverhalten sowie die Änderung der Festigkeit aufgrund einer Änderung des Flüssigkeitsgehaltes berücksichtigt werden. Somit scheint das Modell insbesondere für die Modellierung der Auflockerungszone bzw. einer Materialschädigung in der Betriebsphase gedacht zu sein.

4 Zusammenfassung

4.1 Allgemeines zu Stoffmodellen

Es werden eine Vielzahl an unterschiedlichen Anforderungen an Stoffmodelle gestellt bzw. gefordert. Bei den meisten gesichteten Stoffmodellen stehen die bautechnischen Fragestellungen im Vordergrund (z. B. Standsicherheit von aufgefahrenen Hohlräumen). Vor allem für die Langzeitsicherheit von Endlagern sind vor allem die mechanischen Einwirkungen auf die hydraulischen Parameter interessant, welche für Strömungsrechnungen zum Radionuklidtransport benötigt werden. Die Anforderungen und die spezifischen Fragestellungen legen letztendlich die berücksichtigten Prozesse und somit die Komplexität der Stoffmodelle fest.

Nach /SOU 17/ sollen Stoffmodelle das Materialverhalten bzw. die Integrität folgender Fragestellungen untersuchen:

- die Entwicklung der Integritätseigenschaften des Wirtsgesteins aufgrund der Auffahrung von Hohlräumen,
- die Quantifizierung der physikalischen Prozesse und Kopplungen, die in der technischen Barriere und dem Wirtsgestein auftreten können und
- theoretische Modelle, die in der Lage sind, die bei verschiedenen Arten von Lastpfaden beobachteten Prozesse zu reproduzieren.

Jedes Stoffmodell hat seine Vor- und Nachteile. Je nach Komplexität der abgebildeten Prozesse stellt jedes Stoffmodell nur einen Kompromiss dar. Nach /GUD 01/ ist es deshalb notwendig zu wissen:

"welches Stoffgesetz wann geeignet ist, wie die Stoffkenngrößen praktikabel und zuverlässig zu bestimmen sind, welche Anfangs- und Randbedingungen damit verträglich sind und welche numerische Diskretisierung und Iteration dem Problem angemessen ist." Im Folgenden sind die Prozesse zusammengefasst, die in einem Stoffmodell berücksichtigt werden könnten. Welche Mechanismen implementiert werden sollten, hängt letztendlich von der Fragestellung ab.

- Allgemeine Abhängigkeit der Prozesse von der Belastungsrichtung (Orthotrope Materialparameter).
- elastische, plastische und viskose Deformationen und eine resultierende Gefügeschädigung (CDM) und –verheilung.
 - Bruch- bzw. Dilatanzfestigkeit
 - Verheilung von Auflockerungszonen (Kompaktion, Quellen)
- Änderung der hydro-mechanischen Parameter bei Be- und Entlastung (z. B. hardening/softening).
 - Poro-Perm-Beziehung, Zweiphasenflussparameter, Festigkeit, Steifigkeit
- Porositäts- und Permeabilitätsentwicklung aufgrund von Deformationen bzw. einer Materialschädigung (auch in Bezug auf Schicht- bzw. Schieferungsflächen, modifiziert gegenüber Matrix).
- Zeitabhängiges Verformungsverhalten (Kriechen).
- Abhängigkeit der Materialeigenschaften vom Wassergehalt (Quellverhalten, Kontraktanz, Zweiphasenflussparameter, Festigkeit, Steifigkeit).
 - Kapillardruck-Sättigungsbeziehung (Zweiphasenfluss)
- Abhängigkeit der Materialeigenschaften und der mechanischen Wirkung vom Porenwasserdruck (effektive Spannungen, Temperatur, Quelldruck, Gasbildung).
- Abhängigkeit der Materialeigenschaften von der Temperatur (Kriechen, Festigkeit, Steifigkeit, Flüssigkeitssättigung).

Für die Modellierung des Langzeitverhaltens von Tonstein werden meist vereinfachte Annahmen getroffen, wie z. B. der vollständigen Sättigung oder Entsättigung mit Flüssigkeit bei Simulationsbeginn. Der Flüssigkeitsgehalt wird in der Simulation nicht variiert. Diese Annahme vereinfacht die Prozesse, weil keine Quellung, Schrumpfung und damit keine Volumen-, Festigkeits- und Steifigkeitsänderungen aufgrund einer variablen Flüssigkeitssättigung berücksichtigt werden müssen. Diese Annahmen sind in bestimmten Phasen der Endlagerentwicklung vertretbar, vor allem wenn die langzeitliche Entwicklung im Fokus steht (gesättigte Verhältnisse). Kurzzeitliche Prozesse in der Betriebs- und Übergangsphase, vor allem während der Aufsättigungsphase, der im Nahfeld befindlichen Materialien, könnten nicht realitätsnah modelliert werden.

Die komplexen Prozesse in Tonstein bei Änderung des Flüssigkeitsgehaltes, machen es generell schwierig, allgemein gültige Stoffmodelle zu entwickeln. Insbesondere für Strömungsrechnungen wäre eine hydro-mechanische Kopplung wichtig, um das Materialverhalten (insbesondere Rissbildung und Verheilung) und damit die Durchlässigkeit des Materials realitätsnah simulieren zu können.

Mit der Komplexität der berücksichtigten Prozesse in den Stoffmodellen steigt auch die Anzahl der Eingabeparameter. Da diese aus Laborversuchen, an Proben, In-situ-Experimenten und physikalischen Modellen meistens nur kleinskalig ermittelt werden können und häufig abgeleitet werden müssen (siehe BBM, Kap. 3.4.3), sind diese meist mit Ungewissheiten behaftet. Vor allem das langzeitliche Verhalten ist immer von kurzzeitlichem Labormaßstab auf lange Zeiträume extrapoliert. Mit der Anzahl an berücksichtigten Prozessen und Eingabeparametern, steigt somit auch tendenziell die Ungewissheit der Rechenmodelle bzw. der Analyseergebnisse.

Es zeigt sich, dass aufgrund der mineralogischen Heterogenität und der unterschiedlichen Konsolidierungsgrade, Unterschiede zwischen dem Materialverhalten von Tonsteinen bestehen (auch innerhalb von Formationen). Von /KLI 08/ wurden Untersuchungen zum mechanischen Verhalten am Opalinuston und am Callovo-Oxfordian Tonstein (COx) durchgeführt. Die Versuche zeigten, dass trotz der Ähnlichkeit der Materialeigenschaften, der COx Tonstein aus Frankreich ein unterschiedliches mechanisches Verhalten im Gegensatz zum Opalinuston zeigt. Das unterschiedliche mechanische Verhalten der beiden Gesteine lässt sich mikrostrukturell erklären. Die grobkörnigen, karbonatischen Schalenbruchstücke im Opalinuston begünstigen die Bildung von Schwächezonen. Während der COx Tonstein feinkörnige homogen verteilte Carbonate enthält, welche eine festere Gefügestruktur bilden /KLI 08/.

In /KLI 08/ wird hervorgehoben: "Das wichtigste Ergebnis der Gefügeuntersuchungen ist, dass nicht nur der Karbonatgehalt, sondern auch die Korngröße, Ausbildung und räumliche Verteilung der Karbonate einen Einfluss auf die Festigkeit der Gesteine haben. Es kann weiterhin geschlossen werden, dass kein für Tonstein allgemein gültiges Stoffgesetz (Modell zur Berechnung des mechanischen Verhaltens) erstellt werden kann, dass nicht solche Anisotropien einschließt."

4.2 Ansätze zur Beschreibung eines viskosen Materialverhaltens

Von vielen Autoren wird die Notwendigkeit der Berücksichtigung des Kriechverhaltens von Tonstein hervorgehoben. Nach Zhang /ZHA 13/ ist die Druckschwelle, ab der der Kriechprozess beginnt, nicht klar definierbar und kann sehr gering sein, so dass Kriechprozesse in allen Verformungsphasen auftreten können. Von /HOU 02/ wird hervorgehoben, dass die Kriechfähigkeit von Tonsteinen zwar als sehr gering einzuordnen ist, bei einer langfristigen Analyse aber nicht vernachlässigt werden dürfte.

Entscheidend ist der Anwendungszweck der Stoffmodelle. Für kurzzeitliche Integritätsanalysen in der Betriebs- und auch Übergangsphase kann vermutlich der Kriechprozess vernachlässigt werden. Insbesondere aber für die hydro-mechanische Entwicklung des Ton-Versatzes im Endlagerbergwerk, muss die Verdichtung/Konsolidierung und ein möglicher Kriechprozess berücksichtigt werden.

/ZHA 04/ weist darauf hin, dass immer noch große Unsicherheiten über die Extrapolation von gemessenen Kriechwerten aus dem Labor auf sehr lange Zeiträume bestehen. Die Extrapolation muss auf einem besseren Verständnis der Mikromechanismen beruhen, die das langfristige mechanische Verhalten von Tonstein steuern (siehe hierzu auch /DES 17/).

Die Tab. 4.1 zeigt beispielhaft verschiedene Ansätze, um das Kriechverhalten von Tonstein zu berechnen. Die Modelle berücksichtigen unter anderem verschiedene Mechanismen, wie z. B. Strain Hardening/Softening, Schädigungsmodelle oder eine Temperaturabhängigkeit. Für die Erläuterung der einzelnen Parameter wird auf die entsprechende Literatur bzw. Kapitel verwiesen.

Der einfachste Ansatz von Norton /NOR 29/ (Tab. 4.1-A) ist ein rein spannungsabhängiger Ansatz. Grundsätzlich beschreibt dieses Modell die minimale Kriechgeschwindigkeit als Potenzfunktion der Spannung. Durch diesen Ansatz kann der komplexe Spannungs-Verformungs-Verlauf eines Tonsteines nur unzureichend abgebildet werden. Eine Erweiterung des Norton-Ansatzes mit einer Temperaturabhängigkeit erfolgt durch die Implementierung des Arrhenius-Terms (Tab. 4.1-B). Vor allem für Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle ist eine Temperaturabhängigkeit des Kriechens nicht zu vernachlässigen. Ein häufig verwendeter Mechanismus in Stoffmodellen ist der Perzyna-Ansatz. Das Hauptmerkmal des Perzyna-Ansatzes (Tab. 4.1-C) ist, dass sich die Belastung über die raten/zeit-unabhängige Fließgrenze hinaus erhöhen kann, dieser Effekt wird als "Überlast" bezeichnet. Zudem kann sich die Belastung mit der Zeit auf die ursprüngliche Fließgrenze zurück entspannen /HEE 02/.

Die Ansätze von /ZHA 13/ (Tab. 4.1-D) und /SOU 17/ (Tab. 4.1-E) basieren auf dem Perzyna-Ansatz. Zusätzlich wurde eine Temperaturabhängigkeit implementiert. Der Ansatz von /HOU 02/ (Tab. 4.1-F) enthält zusätzlich eine Schädigungsabhängigkeit.

Tab. 4.1Zusammenstellung von unterschiedlichen Ansätzen zur Berücksichtigung
des Kriechverhaltens von Tonstein

	Modellbezeichnung	Numerischer Ansatz
А	Norton-Ansatz (Kap.3.3.3.3)	$\dot{\varepsilon} = \mathbf{A} \cdot \sigma_{dev}^n$
В	Norton-Ansatz mit Tempera- turabhängigkeit (Arrhenius- Term) (Kap.3.3.3.3)	$\dot{\varepsilon} = A e^{-\frac{Q}{RT}} \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^n$
С	Verformungsraten- abhängiges Plastizitätsmodell (z. B. Perzyna) (Kap.3.3.3.3)	$\dot{\varepsilon}_{vp} = \gamma \langle \Phi \rangle \frac{\partial F}{\partial \sigma}$
D	Ansatz nach Zhang /ZHA 13/ (Kap.3.3.3.4)	$\dot{\varepsilon} = \frac{A}{2} \exp(-\frac{Q}{RT}) \cdot \exp(\alpha\sigma)$
E	Souley /SOU 17/ und Manica /MÁN 17/ (Kap.3.3.3.4)	$\dot{\varepsilon}^{vp} = A_{visc} \exp\left(-\frac{B_0}{RT}\right) \langle \frac{q - g(\sigma')}{\sigma_0} \rangle^n \left(\varepsilon_{eq}\right)^m \frac{\partial q}{\partial \sigma'}$
F	Hou-Lux-T /HOU 02/ (Kap.3.4.2)	$\dot{\varepsilon}_{ij}^{vp} = \frac{3}{2} \left[\frac{1}{\eta_k} \left(1 - \frac{\varepsilon^{tr}}{\max \varepsilon^{tr}} \right) + \frac{1}{\eta_m} \right] \frac{s_{ij}}{1 - D}$

4.3 Abschließende Bemerkungen zum BBM-Model

Eine entscheidende Zielsetzung dieses Berichtes ist die Sichtung vorhandener Stoffmodelle und deren Anwendbarkeit auf Tonstein. Im Fokus liegen hierfür insbesondere Stoffmodelle die bereits für FLAC3D angewendet wurden, da dieses Tool bereits in der GRS verwendet wird. Das BBM-Model ist hier interessant (Kap. 3.4.3), weil hierfür bereits eine Implementierung in FLAC3D durch /RUT 11/ erfolgte. Dieses Modul ist leider nicht in den Standardmodulen von FLAC3D enthalten. Hervorzuheben ist, dass das BBM-Modell die grundlegenden Eigenschaften von Tonstein abbilden kann. Diese sind:

- Quellen und Kontraktion bei Änderung der Flüssigkeitssättigung,
- Einfluss der Saugspannung auf das Bruchverhalten bei jeder Kombination von Spannungen,
- Einfluss der Saugspannung auf die Scherfestigkeit,
- Die Verbindung zwischen der Volumenänderung und Scherung innerhalb eines einzelnen elasto-plastischen Modells, wobei zwischen reversiblen und irreversiblen Dehnungen unterschieden wird und diese auf jeden Belastungspfad anwendbar sind (entspricht modifiziertem Cam-Clay für gesättigte Böden).

Ein Nachteil des BBM-Modells ist, dass ein visko-plastisches Verhalten (Kriechen) nicht berücksichtigt werden kann.

5 Schlussfolgerung und Ausblick

Wesentliches Ziel der Literaturrecherche war, die Grundlagen zur Identifizierung eines Modells zu erarbeiten, welches in der GRS für weiterführende Untersuchungen im Wirtsgesteinsvorhaben (FKZ 4616E03230) verwendet werden sollte.

Es wurde entschieden, dass BBM-Modell für weiterführende Untersuchungen zu verwenden. Das Model berücksichtigt die grundlegenden Eigenschaften von Tonstein. Insbesondere wird ein sättigungsabhängiges Materialverhalten berücksichtigt, welches für sicherheitstechnische hydromechanische Strömungssimulationen geeignet wäre.

Ein zeitabhängiges visko-plastisches Verhalten wird im BBM nicht berücksichtigt. Weitere Arbeiten im Vorhaben sehen jedoch eine Adaptierung vorhandener Modelle vor, somit könnten zusätzliche Mechanismen implementiert werden. Welcher Ansatz geeignet ist, bzw. Mechanismen in einem Kriechmodell berücksichtigt werden sollten, muss anwendungsspezifisch entschieden werden.

Der Fokus bei der Anwendung von Stoffmollen liegt in der Überprüfung der Integritätskriterien bzw. der Langzeitsicherheit des ewG. Deshalb war es zudem erforderlich die Stoffmodelle hinsichtlich dieser Fragestellung zu überprüfen. Im weiteren Projekt-Verlauf soll die Anwendung der entwickelten Konzepte und die Durchführung einer Integritätsanalyse für Tonstein erfolgen.

5.1 Empfehlungen

Grundsätzlich zeigt sich, dass alle gesichteten Stoffmodelle ihre Vor- und Nachteile haben. Ein allgemein gültiges Stoffmodell gibt es nicht. Daher werden keine allgemein gültigen Empfehlungen zu Stoffmodellen gegeben oder welche Prozesse explizit berücksichtigt werden sollten.

Insbesondere muss berücksichtigt werden, dass mit steigender Komplexität der Stoffmodelle, also einer Erhöhung der betrachteten Einzelprozesse, auch die Anzahl freier Parameter steigt. Somit wird allgemein die Ungewissheit des Modells größer. Dies bedeutet, dass ein komplexeres Stoffmodell mit dem einhergehenden Aufwand nicht notwendigerweise zu einem größeren Vertrauen in die Ergebnisse führt. Möglicherweise können einfachere Modelle zielführender sein als komplexere Modelle.
Grundsätzlich sollte im Vorfeld von Untersuchungskampagnen (insbesondere für die neu initiierte Standortsuche) entschieden werden, welche Parameter bei der obertägigen und untertägigen Erkundung für die späteren Untersuchungen ermittelt werden sollten. Durch Vorüberlegungen welche Modellierungen und Materialuntersuchungen in welcher Phase der Endlagersuche benötigt werden, können spätere Probleme bei der Datenbeschaffung bzw. die Erhebung unnötiger Daten möglicherweise verhindert werden.

Literaturverzeichnis

- /ABA 14/ Abaqus: Abaqus 6.14 Analysis Users Guide, Volume III: Materials.
 SIMULIA, erreichbar unter https://www.sharcnet.ca/Software/Abaqus/
 6.14.2/v6.14/pdf_books/index.pdf, Stand von 2014.
- /AKE 02/ Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte (AkEnd): Auswahlverfahren für Endlagerstandorte, Empfehlungen des AkEnd - Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte, Abschlussbericht. 260 S.: Köln, Dezember 2002.
- /ÅKE 08/ Åkesson, M., Kristensson, O.: Mechanical modeling of MX-80–
 Development of constitutive laws. Physics and Chemistry of the Earth –
 Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Bd. 33, S. S504-S507, DOI 10.1016/j.pce.2008.10.014, 2008.
- /AL- 98/ Al-Harthi, A. A.: Effect of planar structures on the anisotropy of Ranyah sandstone, Saudi Arabia. Engineering Geology, Nr. 50, S. 49–57, 1998.
- /ALO 90/ Alonso, E. E., Gens, A., Josa, A.: A constitutive model for partially saturated soils. Géotechnique, Bd. 40, Nr. 3, S. 405–430, DOI 10.1680/geot.1990.40.3.405, 1990.
- /ALT 15/ Altenbach, H.: Kontinuumsmechanik, Einführung in die materialunabhängigen und materialabhängigen Gleichungen. 3. Aufl., 340 S., DOI 10.1007/978-3-662-47070-1, Springer, 2015.
- /AME 04/ Amelung, P., Bollingerfehr, W., Filbert, W., Müller-Hoeppe, N., Polster, M., Ziegenhagen, J., Behrens, J., Kutowski, J., Schwarz, T.: Gegenüberstellung von Endlagerkonzepten in Salz und Tongestein (FKZ 02 E 9511) GEIST, Vergleich der technischen Endlagerkonzepte im Wirtsgestein Salz und Ton (A2). 189 S., Dezember 2004.
- /AME 07/ Amelung, P., Billaux, D., Polster, M., Schmidt, H., Uhlig, L.: Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Auslegung eines generischen Endlagers im Tonstein in Deutschland, - GENESIS -, Abschlussbericht. Hrsg.: Jobmann, M., Uhlig, L., DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), März 2007.

- /AND 05a/ Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs (ANDRA): Dossier 2005 Argile, Synthesis: Evaluation of the feasibility of a geological repository in an argillaceous formation, Meuse/Haute-Marne site. Collection les Rapports, Bd. 268, 241 S., ISBN 2-916162-00-3: Châtenay-Malabry, France, 2005.
- /AND 05b/ Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs (ANDRA): Dossier 2005 Argile, Tome: Safety evaluation of a geological repository. Report Series, 525 S., ISBN 2-9510108-7-70108-8-5: Châtenay-Malabry, France, 2005.
- /AND 05c/ Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs (ANDRA): Dossiert 2005 Argile, Tome: Architecture and management of a geological repository. Report Series, C.RP.ADP.04.0001, 495 S., ISBN 2-9510108-7-70108-8-5: Châtenay-Malabry, France, Dezember 2005.
- /ANS 19/ ANSYS: Strukturanalyse. Stand von 2019, erreichbar unter https:// www.ansys.com/de-de/products/structures/, abgerufen am 9. Januar 2019.
- /AZI 00/ Azizi, F.: Applied analyses in geotechnics. 753 S., ISBN 0419253505, E & FN Spon: London, 2000.
- /BAR 10/ Bartlett, S. F.: Modified Cam Clay (MCC) Model. Stand vom 11. März 2010, erreichbar unter http://www.civil.utah.edu/~bartlett/CVEEN6920/ Modified%20Cam%20Clay%20%28MCC%29%20Model.pdf, abgerufen am 13. Juni 2017.
- /BEH 07/ Behnsen, J. G.: Anionenkonkurrenz und Anionenselektivität bei der Sorption von Radionukliden durch Organotone. Dissertation, 125 S., Wilhelm Leibniz Universität Hannover: Hannover, 2007.
- /BEN 17/ Benz, T., Bergholz, K.: Geotechnische Materialmodelle im Spannungsfeld zwischen Forschung und Praxis. In: BAW-Bundesanstalt f
 ür Wasserbau (Hrsg.): Nat
 ürliche, k
 ünstliche und virtuelle Stoffe in der Geotechnik. Bundesanstalt f
 ür Wasserbau, BAWMitteilungen, Bd. 101, S. 73–86: Karlsruhe, 2017.

- /BEU 12/ Beuth, T., Bracke, G., Buhmann, D., Dresbach, C., Keller, S., Krone, J., Lommerzheim, A., Mönig, J., Mrugalla, S., Rübel, A., Wolf, J.: Szenarienentwicklung, Methodik und Anwendung, Bericht zum Arbeitspaket 8, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-284, 239 S., ISBN 978-3-939355-60-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012.
- /BFS 07/ Bundesamt für Strahlenschutz (BfS): Entwicklung eines synthetischen Tonsteinstandortes. Entwurf: Salzgitter, 1. November 2007.
- /BIA 17/ Bian, H., Zhang, X., Shao, J.: A coupled elastoplastic and visco-plastic damage model for hard clay and its application for the underground gallery excavation. Underground Space, Bd. 2, Nr. 1, S. 60–72, DOI 10.1016/j.undsp.2017.03.002, 2017.
- /BMU 09/ Bundesministerium f
 ür Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung w
 ärmeentwickelnder radioaktiver Abf
 älle. Bonn, 1. Juli 2009.
- /BMU 10/ Bundesministerium f
 ür Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung w
 ärmeentwickelnder radioaktiver Abf
 älle. 22 S.: Bonn, 30. September 2010.
- /BOC 01/ Bock, H.: RA experiment Rock mechanics analyses and synthesis, Data report on rock mechanics. Mont Terri Project, Mont Terri Technical Report, TR 2000-02, July 2001.
- /BOC 09/ Bock, H.: RA Experiment: Updated Review of the Rock Mechanics Properties of the Opalinus Clay of the Mont Terri URL based on Laboratory and Field Testing. Mont Terri Project, Technical Report, TR 2008-04, 66 S.: Wabern/Schweiz, 2009.

- /BÖN 04/ Bönsch, C.: Interaktionen von Wasser und wässerigen Lösungen mit Tonen, Auswirkungen auf Baugrund- und Hangstabilität, Gleit-, Rutsch- und Rheologieverhalten von Tonen. Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Stand vom 12. Oktober 2004, erreichbar unter http://www.geologie.unihalle.de/igw/inggeo/Inhalt/Boensch/Ton.htm, abgerufen am 7. Juni 2017.
- /BRA 02/ Brasser, T., Mönig, J., Scherschel, C., Veerhoff, M.: Sorptionsdatenbank SODA, Datenbank zur Bestandsaufnahme und Bewertung geochemischer Informationen zum Verhalten von Abfallinhaltsstoffen im Deckgebirge einer UTD/UTV. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-182: Braunschweig, Mai 2002.
- /BRA 04/ Brady, B. H. G., Brown, E. T.: Rock mechanics : for underground mining. 3. Aufl., 648 S., ISBN 978-1402020643, 2004.
- /BRA 08/ Brasser, T., Fein, E., Herbert, H.-J., Miehe, R., Müller-Lyda, I., Noseck, U., Schmidt, U., Rübel, A.: Anhang Parameter, Messmethoden und Bedeutung. In: Müller-Lyda, I., Sailer, M.: Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in Deutschland, BMWi-Vorhaben, FKZ 02E9783 & 02E9793. GRS-247, ISBN 978-3-939355-22-9, Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) mbH; Öko-Institut e.V.: Braunschweig / Darmstadt, September 2008.
- /BRA 19/ Bracke, G., Hartwig-Thurat, E., Larue, J., Meleshyn, A., Weyand, T.: Untersuchungen zu den "maximalen physikalisch möglichen Temperaturen" gemäß § 27 StandAG im Hinblick auf die Grenztemperatur an der Außenfläche von Abfallbehältern. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Januar 2019.
- /BRI 05/ Brinkgreve, R.B.J.: Selection of soil models and parameters for geotechnical engineering application. American Society of Civil Engineers (ASCE), Geotechnical special publication, Nr. 128, 30 S., 2005.
- /BRI 16/ Brinkgreve, R.B.J., Kumarswamy, S., Swolfs, W. M.: PLAXIS 2016. Plaxis bv: Delft, 2016.

- /BUR 15/ Burbulla, F.: Kontinuumsmechanische und bruchmechanische Modelle für Werkstoffverbunde. Uni Kassel, Institut für Mechanik: Kassel, 2015.
- /BUR 16/ Burlaka, V., Jobmann, M., Meleshyn, A., Rübel, A.: Spezifische Prozessanalysen, Projekt ANSICHT. DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), Arbeitsbericht, TEC-13-2016-B, 85 S.: Peine, 4. Juli 2016.
- /BUR 18/ Burg, J.-P.: Mechanische Aspekte der Deformation, Vorlesungsskript Strukturgeologie. ETH Zürich: Zürich, Stand vom 6. Januar 2018, erreichbar unter http://www.files.ethz.ch/structuralgeology/jpb/files/struk/1span.pdf, 2018.
- /COM 15/ COMSOL Inc. (Hrsg.): Introduction to COMSOL Multiphysics, Version: COMSOL 5.2. 2015.
- /COM 18/ Comsol: Geomechanics Module. COMSOL Inc., Stand von 2018, erreichbar unter https://www.comsol.de/geomechanics-module, abgerufen am 26. September 2018.
- /CUI 95/ Cui, Y. J., Delage, P., Sultan, N.: An Elastoplastic Model for Compacted Soils. In: Alonso, E. E., Delage, P. (Hrsg.): Unsaturated soils, Sols non saturés : proceedings of the First International Conference on Unsaturated Soils, UNSAT '95, Paris, France, 6-8 September 1995. ISBN 90-5410-583-6, Presses de l'École nationale des ponts et chaussées; A.A. Balkema: Paris, Rotterdam, Brookfield [VT], 1995-1996.
- /CZA 11/ Czaikowski, O.: Laborative und rechnerische Untersuchungen zu geomechanisch-geohydraulischen Wechselwirkungen im Tongestein im Hinblick auf die Endlagerung radioaktiver Abfälle. Hrsg.: Lux, K. H., Institut für Aufbereitung, Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Schriftenreihe Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik, Institut für Aufbereitung, Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Nr. 17, 311 S.: Clausthal, 2011.
- /DEL 13/ Delage, P.: On the thermal impact on the excavation damaged zone around deep radioactivewaste disposal. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, Nr. 5, S. 179–190, 2013.

- /DEL 14/ Delay, J., Bossart, P., Ling, L. X., Blechschmidt, I., Ohlsson, M., Vinsot, A., Nussbaum, C., Maes, N.: Three decades of underground research laboratories: what have we learned? In: Norris, S., Bruno, J., Cathelineau, M., Delage, P., Fairhurst, C., Gaucher, E. C., Höhn, E. H., Kalinichev, A., Lalieux, P., Sellin, P. (Hrsg.): Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement. Geological Society, London, Special Publications, Nr. 400, S. 7–32, ISBN 9781862396760, DOI 10.1144/SP400, 2014.
- /DES 17/ Desbois, G., Höhne, N., Urai, J. L., Bésuelle, P., Viggiani, G.: Deformation in cemented mudrock (Callovo–Oxfordian Clay) by microcracking, granular flow and phyllosilicate plasticity, Insights from triaxial deformation, broad ion beam polishing and scanning electron microscopy. Solid Earth, Bd. 8, Nr. 2, S. 291–305, DOI 10.5194/se-8-291-2017, 2017.
- /DGGT 14/ Deutsche Gesellschaft f
 ür Geotechnik e.V. (DGGT): Empfehlungen des Arbeitskreises "Numerik in der Geotechnik", EANG. 196 S., ISBN 9783433604496, John Wiley & Sons, 2014.
- /DRU 52/ Drucker, D. C., Prager, W.: Soil Mechanics and plastic analysis or limit design. Quarterly of Applied Mathematics, 10, Vol.2, S. 157–165, 1952.
- /EDF 18/ EDF: code_aster Structures and Thermomechanics Analysis for Studies and Research. Électricité de France (edf), Stand von 2018, erreichbar unter https://www.code-aster.org/spip.php?rubrique18, abgerufen am 9. Januar 2019.
- /EUR 05/ European Commission (EC): ECOCLAY II, Effects of Cement on Clay Barrier Performance – Phase II. Final Report, FIKW-CT-2000-00018, 2005.
- /FAH 15/ Fahimifar, A., Karami, M., Fahimifar, A.: Modifications to an elasto-viscoplastic constitutive model for prediction of creep deformation of rock samples. Soils and Foundations, Bd. 55, Nr. 6, S. 1364–1371, DOI 10.1016/j.sandf.2015.10.003, 2015.

- /FRI 12/ Frieling, G., Bracke, G.: Modellaufbau und Randbedingungen für den zweiphasigen Radionuk-lidtransport (TOUGH2), Memo im Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 4. Dezember 2012.
- /GAU 02/ Gautschi, A., Lambert, A., Zuidema, P.: Projekt Opalinuston Synthese der geowissenschaftlichen Untersuchungsergebnisse. Hrsg.: Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA), Nagra Technischer Bericht, NTB 02-03, 659 S.: Wettingen, Schweiz, 1. Dezember 2002.
- /GEN 95/ Gens, A.: Constitutive Laws. In: Gens, A., Jouanna, P., Schrefler, B. A. (Hrsg.): Modern Issues in Non-Saturated Soils. S. 129–158, ISBN 978-3-211-82783-3, DOI 10.1007/978-3-7091-2692-9_2, Springer Vienna: Vienna, 1995.
- /GEN 06/ Gens, A., Sánchez, M., Sheng, D.: On constitutive modelling of unsaturated soils. Acta Geotechnica, Bd. 1, Nr. 3, S. 137–147, DOI 10.1007/s11440-006-0013-9, 2006.
- /GIM 03/ Gimmi, T.: Porosity, pore structure and energy state of porewater of Opalinus Clay from Benken, Unpubl. Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA): Baden / Schweiz, 2003.
- /GRA 13/ Grabe, J., Pucker, T.: Numerisch gestützte Entwicklung von Geräten und Verfahren des Spezialtiefbaus. In: Vogt, N. (Hrsg.): Geotechnik-Tag in München. Lehrstuhl und Prüfamt für Grundbau, Bodenmechanik, Felsmechanik und Tunnelbau der Technischen Universität München, Beiträge zum 12. Geotechnik-Tag, München, Schriftenreihe, Heft 56, 2013.
- /GUD 01/ Gudehus, G.: Stoffgesetze für Böden aus physikalischer Sicht. In: Smoltczyk, U. (Hrsg.): Grundbau-Taschenbuch, Teil 1, Geotechnische Grundlagen. Bd. 1, 6. Aufl., S. 203–254, ISBN 978-3433014455, Ernst & Sohn: Berlin, 2001.

- /HEE 02/ Heeres, O. M., Suiker, A. S.J., Borst, R. de: A comparison between the Perzyna viscoplastic model and the Consistency viscoplastic model. European Journal of Mechanics - A/Solids, Bd. 21, Nr. 1, S. 1–12, DOI 10.1016/S0997-7538(01)01188-3, 2002.
- /HEE 14/ Heemann, U., Kull, H., Li, S., Miehe, R., Müller, C.: VIRTUS, Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz, Anhang B Protokolle Literaturauswertung der Daten zum thermisch-hydraulisch-mechanischen Materialverhalten von Salzgesteinen und EBS-Materialien, BMWi-Vorhaben, FKZ 02E10890.
 Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-354
 Anhang B, 249 S., ISBN 3944161343: Braunschweig, Dezember 2014.
- /HEI 90/ Heim, D.: Tone und Tonminerale, Grundlagen der Sedimentologie und Mineralogie. 157 S., ISBN 3432987412, Enke Verlag: Stuttgart, 1990.
- /HEL 11/ Hellenkamp, T.: Felsmechanische Untersuchungen zur zeitabhängigen Gesteinsdeformation im untertägigen Kohlebergbau. Dissertation, Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik, Ruhr-Universität Bochum: Bochum, 16. November 2011.
- /HER 05/ Herle, I., Masin, D.: Einfluss von bodenmechanischen Aspekten auf numerische Ergebnisse. TU Hamburg-Harburg, Veröffentlichungen des Arbeitsbereiches Geotechnik und Baubetrieb, Nr. 10, 2005.
- /HER 06/ Herbert, H.-J., Moog, H. C., Meyer, L., Reichelt, C.: Modellentwicklung zur Quellung hochkompaktierter Bentonite, Bentonite im Kontakt mit Lösungen unterschiedlicher Salinität im Temperaturbereich von 25 - 120°C. GRS-211, 103 S., ISBN 3-931995-78-X, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Braunschweig, 2006.
- /HOE 80/ Hoek, E., Brown, E. T.: Empirical strength criterion for rock masses. J. Geotech. Engng Div., Nr. 106, S. 1013–1035, 1980.
- /HOE 88/ Hoek, E., Brown, E. T.: The Hoek-Brown failure Criterion a 1988 Update. Proc. 15th Canadian Rock Mech. Symp., 31-38, 1988.

- /HOF 03/ Hoffmann, H.: Einfluss konzentrierter Salzlösungen auf die physikochemischen Eigenschaften quellfähiger Tonminerale, Konsequenzen für den Einsatz von Bentonit als Versatzsmaterial in einem Endlager für schwach- und mittelradioaktive Abfälle in Salzformationen. Dissertation, 140 S., Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg: Heidelberg, 2003.
- /HOT 07/ Hoth, P., Wirth, H., Reinhold, K., Bräuer, V., Krull, P., Feldrappe, H.: Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen Deutschlands, Untersuchung und Bewertung von Tongesteinsformationen. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), 118 S.: Hannover, 1. April 2007.
- /HOU 02/ Hou, Z.: Geomechanische Planungskonzepte f
 ür untert
 ägige Tragwerke mit besonderer Ber
 ücksichtigung von Gef
 ügesch
 ädigung, Verheilung und hydromechanischer Kopplung. Habilitation, Technische Universit
 ät Clausthal-Zellerfeld: Clausthal-Zellerfeld, 1. Januar 2002.
- /HUE 05/ Huertas, F. e. a.: Full-Scale Engineered Barriers Experiment for a Deep Geological Repository for High-Level Waste in Crystalline Host Rock – Phase II, FEBEX II. Final Report, FIKW-CT-2000-00016, 2005.
- /ITA 18/ Itasca: FLAC3D Constitutive Models. ITASCA Consulting Group Inc.: Minneapolis, Stand von 2018, erreichbar unter http://www.itascacg.com/ software/products/flac3d/features/flac3d-constitutive-models, abgerufen 2018.
- /JAE 60/ Jaeger, J. C.: Shear failure of anisotropic rocks. Geological Magazine, Nr. 97, 1960.
- /JAH 16/ Jahn, S., Mrugalla, S., Stark, L.: Endlagerstandortmodell SÜD (AnSichT), Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis, Ergebnisbericht. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), 146 S.: Hannover, 8. Januar 2016.

- JOB 17/ Jobmann, M., Bebiolka, A., Jahn, S., Lommerzheim, A., Maßmann, J., Meleshyn, A., Mrugalla, S., Reinhold, K., Rübel, A., Stark, L., Ziefle, G.: Projekt ANSICHT, Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager im Tongestein in Deutschland, Synthesebericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), TEC-19-2016-AB, 30. März 2017.
- /JOS 92/ Josa, A., Balmaceda, A., Gens, A., Alonso, E. E.: An elasto-plastic model for partially saturated soil exhibiting a maximum of collapse. In: Owen, D. R. J., Oñate, E., Hinton, E. (Hrsg.): Computational plasticity, Fundamentals and applications. S. 815–826, ISBN 0906674794, Pineridge Press in co-operation with Centro Internacional de Metodos Numericos en Ingenieria, 1992.
- /KAT 13a/ Katzenbach, R.: Studienunterlagen Geotechnik. TU Darmstadt Institut und Versuchsanstalt für Geotechnik: Darmstadt, 2013.
- /KAT 13b/ Katzenbach, R.: Studienunterlagen Anwendung der FEM in der Geotechnik. Technische Universität Darmstadt, 170 S.: Darmstadt, 2013.
- /KLI 08/ Klinkenberg, M., Dohrmann, R., Siegesmund, S.: Laboratory Testing of Opalinus Clay (LT) Experiment: Comparison of Opalinus Clay and Callovo-Oxfordian clay-stone with respect to mechanical strength and carbonate microfabric. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Mont Terri Technical Report, 59 S.: Hannover, August 2008.
- /KOL 11/ Kolymbas, D.: Geotechnik, Bodenmechanik, Grundbau und Tunnelbau. 3. Aufl., 579 S., ISBN 9783642204821, Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- /KOL 12/ Kolditz, O., Bauer, S., Bilke, L., Böttcher, N., Delfs, J. O., Fischer, T., Görke, U. J., Kalbacher, T., Kosakowski, G., McDermott, C. I., Park, C. H., Radu, F., Rink, K., Shao, H., et al.: OpenGeoSys: An open-source initiative for numerical simulation of thermo-hydro-mechanical/chemical (THM/C) processes in porous media. Environmental Earth Sciences, Bd. 67, Nr. 2, S. 589–599, DOI 10.1007/s12665-012-1546-x, 2012.

- /KON 07/ Kondo, D., Welemane, H., Cormery, F.: Basic concepts and models in continuum damage mechanics. Revue européenne de génie civil, Bd. 11, 7-8, S. 927–943, DOI 10.3166/regc.11.927-943, 2007.
- /KRE 10/ Kreuter, H., Mutschler, T., Schoenball, M., Tembe, S., Rübel, S., Osan, C., Balthasar, K., Wenke, A., Sperber, A.: Reduzierung der geologisch bedingten bohrtechnischen Risiken, Bohrlochstabilität in tertiären Tonsteinfolgen im Oberrheingraben als Hindernis für die Erschließung geothermischer Reservoire, Abschlussbericht. Karlsruher Institut für Technologie (KIT): Karlsruhe, 2010.
- /KRÖ 09/ Kröhn, K. P., Stührenberg, D., Herklotz, M., Heemann, U., Lerch, C., Xie,
 M.: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager - Phase 1. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-254, 266 S., ISBN 978-3-939355-29-8, 2009.
- /KUD 13/ Kudla, W., Schreiter, F., Gruner, M., Jobmann, M., Bollingerfehr, W., Herold, P., Müller-Hoeppe, N., Freyer, D., Wilsnack, T., Grafe, F.: Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle, TU Bergakademie Freiberg (02E10921) und DBE TECHNOLOGY (02E10900). TU Bergakademie Freiberg, DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), Abschlussbericht Verbundvorhaben ELSA, 1. Januar 2013.
- /KUN 10/ Kuna, M.: Schädigungsmechanik Theorie, Numerik und Anwendung. Technische Universität Bergakademie Freiberg, Institut f
 ür Mechanik und Fluiddynamik: Freiberg, 2010.
- /LAD 77/ Lade, P. V.: Elasto-plastic stress-strain theory for cohesionless soil with curved yield surface. Int. J. Solids and Struct, Nr. 13, S. 1019–1035, 1977.
- /LAR 10/ Larue, P.-J.: VerSi Endlagerung im Tonstein, Entwicklung eines synthetischen Tonsteinstandortes" Teil 2, Standortcharakterisierung, Teilbericht des Abschlussberichtes zum Vorhaben 3607R02538 "planerische Grundsatzfragen". Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3535, 107 S.: Köln, 1. Januar 2010.

- /LEM 85/ Lemaitre, J.: Coupled elasto-plasticity and damage Constitutive Equations.
 Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Nr. 51, S. 31– 49, 1985.
- /LEP 12/ Le Pense, S., Gatmiri, B., Pouya, A.: On Elastoplastic Damage Modelling in Unsaturated Geomaterials. 2nd European Conference on Unsaturated Soils, 143-149, DOI 10.1007/978-3-642-31343-1: Neapel, Italien, Jun 2012.
- /LEP 15/ Le Pense, S., Arson, C., Pouya, A.: A fully coupled damage-plasticity model for unsaturated geomaterials accounting for the ductile-brittle transition in drying clayey rocks. 33 S., 1. April 2015.
- /LUX 84/ Lux, K. H.: Gebirgsmechanischer Entwurf und Felderfahrungen im Salzkavernenbau. Forschungsergebnisse aus dem Tunnel- und Kavernenbau, Bd. 8, 360 S., ISBN 3432941714, Ferdinand Enke Verlag: Stuttgart, 1984.
- /LUX 02/ Lux, K. H.: Entwicklung und Fundierung der Anforderung "Günstige gebirgsmechanische Voraussetzungen", Teil B: Weiterführende laborative und rechnerische Untersuchungen, Gutachten im Auftrag des AkEnd. Technische Universität Clausthal-Zellerfeld, 130 S.: Clausthal-Zellerfeld, Dezember 2002.
- /MÄD 09/ Mäder, U.: Reference pore water for the Opalinus Clay and "Brown Dogger" for the provisional safety-analysis in the framework of the sectoral planinterim results (SGT-ZE). Hrsg.: Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA), University of Bern, Institute of Geological Sciences, Nagra Arbeitsbericht, NAB 09-14: Wettingen / Schweiz, 2009.
- /MÁN 17/ Mánica, M., Gens, A., Vaunat, J., Ruiz, D. F.: A time-dependent anisotropic model for argillaceous rocks. Application to an underground excavation in Callovo-Oxfordian claystone. Computers and Geotechnics, Bd. 85, S. 341– 350, DOI 10.1016/j.compgeo.2016.11.004, 2017.

- /MAR 13/ Marsch, K., Thermann, K.: Vergleichende 2D und 3D FE-Berechnungen für die Kaverne des PSW Vianden. In: Technische Universität München: Natursteine, Natural and building stones. 19. Tagung für Ingenieurgeologie mit Forum für junge Ingenieurgeologen, München, 13.-16.03.2013, S. 541– 546, 2013.
- /MAR 14/ Marschall, P., Giger, S.: Geologische Grundlagen, Dossier IV Geomechanische Unterlagen, SGTEtappe 2: Vorschlag weiter zu untersuchender geologischer Standortgebiete mit zugehörigen Standortarealen für die Oberflächenanlage. Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA), Technischer Bericht, NTB 14-02, 172 S.: Wettingen, Dezember 2014.
- /MAR 16/ Marschall, P., Giger, S.: Geomechanische Unterlagen, ENSI-Nachforderung zum Indikator "Tiefenlage im Hinblick auf bautechnische Machbarkeit" in SGT Etappe 2. Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA), Nagra Arbeitsbericht, NAB 16-43, 51 S.: Wettingen, Juli 2016.
- /MAß 16/ Maßmann, J.: Endlagerstandortmodell SÜD (AnSichT), Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Berechnungen im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises, Ergebnisbericht. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), 20 S.: Hannover, 15. Juni 2016.
- /MAT 74/ Matsuoka, H., Nakai, T.: Stress-deformation and strength Characteristics of soil under three different principal stresses. Proceedings of the Japan Society of Civil Engineers, Nr. 232, S. 59–70, 1974.
- /MAT 94/ Mattheß, G.: Die Beschaffenheit des Grundwassers. Lehrbuch der Hydrogeologie, Bd. 2, 3. Aufl., 499 S., ISBN 3443010083, Borntraeger: Berlin, Stuttgart, 1994.
- /MIE 10/ Miehe, R., Czaikowski, O., Wieczorek, K.: Barrier Integrity of the Isolating Rock Zone in Clay Formations, Final Report. Gesellschaft f
 ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-261, 89 S., ISBN 978-3-939355-36-6: Braunschweig, 2010.

- /MIS 13/ Mises, R.v.: Mechanik der festen Körper in plastisch-deformablen Zustand.Nachr. d. Kgl. Ges. Wiss. Göttingen, S. 582–592, 1913.
- /MIT 92/ Mitchell, J. K.: Characteristics and Mechanisms of Clay Creep and Creep Rupture. In: Low, P. F., Mitchell, J. K., Sposito, G., van Olphen, H., Güven, N., Pollastro, R. M. (Hrsg.): Clay-Water Interface and its Rheological Implications. Nr. 4, S. 212–244, ISBN 9781881208044, DOI 10.1346/CMS-WLS-4, Clay Minerals Society: Boulder, Colorado, 1992.
- /MON 12/ Monfared, M., Sulem, J., Delage, P., Mohajerani, M.: A laboratory investigation on the thermal properties of the Opalinus claystone. Rock Mechanics and Rock Engineering, 44/4, S. 735–747, 2012.
- /NAG 01/ Nationale Genossenschaft f
 ür die Lagerung radioaktiver Abf
 älle (NAGRA): Sondierbohrung Benken Untersuchungsbericht. Technischer Bericht, 00-01, 328 S.: Wettingen, August 2001.
- /NAG 14a/ Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA): SGT Etappe 2: Vorschlag weiter zu untersuchender geologischer Standortgebiete mit zugehörigen Standortarealen für die Oberflächenanlage, Charakteristische Dosisintervalle und Unterlagen zur Bewertung der Barrierensysteme. Nagra Technischer Bericht, NTB 14-03: Wettingen, Dezember 2014.
- /NAG 14b/ Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA):
 Beurteilung der Tiefenlage in Bezug auf die geotechnischen Bedingungen:
 Grundlagen für die Abgrenzung und Bewertung der Lagerperimeter. Nagra
 Arbeitsbericht, 14-81, 157 S.: Wettingen/Schweiz, Dezember 2014.
- /NAU 07/ Naumenko, K., Altenbach, H.: Modeling of Creep for Structural Analysis.ISBN 9783540708391, Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- /NAV 05/ Navarro, M.: Verhalten und Barrierewirkung toniger Wirtsgesteine in einem Endlagersystem f
 ür radioaktive Abf
 älle. Gesellschaft f
 ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS - A - 3219, 128 S.: K
 öln, 2005.

- /NAV 19/ Navarro, M., Frieling, G., Weyand, T.: Integritätskriterien für einen einschlusswirksamen Gebirgsbereich im Tongestein. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-522, ISBN 978-3-947685-07-3: Köln, 2019.
- /NEU 64/ Neumann, R.: Geologie für Bauingenieure. Ernst & Sohn Verlag: Berlin, 1964.
- /NIE 97/ Niemunis, A., Herle, I.: Hypoplastic model for cohesionless soils with elastic strain range. Mechanics of Cohesive-frictional Materials, Bd. 2, Nr. 4, S. 279–299, DOI 10.1002/(SICI)1099-1484(199710)2:4<279:AID-CFM29>3.0.CO;2-8, 1997.
- /NIE 17/ Niemunis, A.: Theoretische Bodenmechanik, Skript zur Vorlesung Theoret. Bodenmechanik von A.Niemunis am IBF KIT. Institut f
 ür Bodenmechanik und Felsmechanik am KIT: Karlsruhe, 6. April 2017.
- /NIX 03/ Nix, T.: Untersuchung der ingenieurgeologischen Verhältnisse der Grube Messel (Darmstadt) im Hinblick auf die Langzeitstabilität der Grubenböschungen. TU Darmstadt, Dissertation, 3 S.: Darmstadt, 2003.
- /NOR 29/ Norton, F. H.: Creep of Steel at High Temperatures. McGraw-Hill Book Company: New York, 1929.
- /OLI 00/ Olivella, S., Gens, A.: Vapour transport in low permeability unsaturated soils with capillary effects. Transport in Porous Media, Bd. 40, Nr. 2, S. 219–241, DOI 10.1023/A:1006749505937, 2000.
- /PER 66/ Perzyna, P.: Fundamental problems in viscoplasticity. Recent Advances in Applied Mechanics, Nr. 9, S. 243–377, 1966.
- /PLA 16/ Plaxis: Material Models Manual. erreichbar unter https://www.plaxis.com/ support/manuals/plaxis-3d-manuals/, abgerufen am 18. Januar 2019.
- /PLA 17/ Plaxis: Material Models Manual. erreichbar unter https://www.plaxis.com/? plaxis_download=3D-3-Material-Models.pdf, abgerufen am 18. Januar 2019.

- /PÖH 10/ Pöhler, M., Amelung, P., Bollingerfehr, W., Engelhardt, H. J., Filbert, W., Tholen, M.: Referenzkonzept für ein Endlager für radioaktive Abfälle in Tongestein, ERATO, Abschlussbericht. DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC), TEC-28-2008-AB, 320 S.: Peine, Juni 2010.
- /PRI 64/ Price, N. J.: A study of the time-strain behaviour of coal-measure rocks. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts, Bd. 1, Nr. 2, S. 277–303, DOI 10.1016/0148-9062(64)90031-2, 1964.
- /ROS 58/ Roscoe, K. H., Schofield, A. N., Wroth, C. P.: On The Yielding of Soils. Geotechnique, Bd. 8, Nr. 1, S. 22–53, DOI 10.1680/geot.1958.8.1.22, 1958.
- /ROS 68/ Roscoe, K. H., Burland, J. B.: On the generalized stress-strain behaviour of wet clay. In: Heyman, J., Leckie, F. A. (Hrsg.): Engineering Plasticity, Papers for a Conference held in Cambridge March 1968. S. 539–609, Cambridge University Press, 1968.
- /ROT 12/ Rothfuchs, T., Czaikowski, O., Hartwig, L., Hellwald, K., Komischke, M., Miehe, R., Zhang, C.-L.: Self-Sealing Barriers of Sand/Bentonite-Mixtures in a Clay Repository, SB-Experiment in the Mont Terri Rock Laboratory, Final Report. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-302, ISBN 978-3-939355-81-6: Braunschweig, Oktober 2012.
- /RÜB 04/ Rübel, A., Noseck, U., Müller-Lyda, I., Kröhn, K.-P., Storck, R.: Konzeptioneller Umgang mit Gasen im Endlager. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-205: Braunschweig, 1. Dezember 2004.
- /RÜB 07/ Rübel, A., Becker, D.-A., Fein, E.: Radionuclide transport modelling, Performance assessment of repositories in clays. Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-228: Braunschweig, Dezember 2007.

- /RUT 11/ Rutqvist, J., Ijiri, Y., Yamamoto, H.: Implementation of the Barcelona Basic Model into TOUGH–FLAC for simulations of the geomechanical behavior of unsaturated soils. Computers and Geosciences, Bd. 37, Nr. 6, S. 751–762, DOI 10.1016/j.cageo.2010.10.011, 2011.
- /RUT 15/ Rutqvist, J.: Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Behavior of Natural and Engineered Clay Barriers. In: Tournassat, C., Steefel, C. I., Bourg, I. C., Bergaya, F. (Hrsg.): Natural and engineered clay barriers. Developments in clay science, Bd. 6, S. 329–355, ISBN 978-0-08-100027-4, DOI 10.1016/B978-0-08-100027-4.00009-7, Elsevier: Amsterdam, 2015.
- /SAI 08/ Sainsbury, B. L., Ivars, D. M.: Analysis of Caving Behaviour Using a Synthetic Rock Mass Ubiquitous Joint Rock Mass Modelling Technique.
 Australian Centre for Geomechanics, Proceedings of the First Southern Hemisphere International Rock Mechanics Symposium, 243-253: Perth, 2008.
- /SAI 17/ Sainsbury, B. L., Sainsbury, D. P.: Practical Use of the Ubiquitous-Joint Constitutive Model for the Simulation of Anisotropic Rock Masses. Rock Mechanics and Rock Engineering, Bd. 50, S. 1507–1528, DOI 10.1007/s00603-017-1177-3, 2017.
- /SCH 68/ Schofield, A. N., Wroth, P.: Critical State Soil Mechanics. 228 S.: Cambridge, 1968.
- /SCH 09/ Schmitt, J. A.: Spannungsverformungsverhalten des Gebirges beim Vortrieb mit Tunnelbohrmaschinen mit Schild. Fakultät Architektur, Bauingenieurwesen und Umweltwissenschaften der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Dissertation: Braunschweig, 2009.
- /SCH 11/ Schwarz, V.: Mechanisches Verhalten eines teilgesättigten Tons: Experimentelle Untersuchungen, Stoffmodell und Implementierung. Hrsg.: Vrettos, C., Technische Universität Kaiserslautern, Dissertation, 136 S.: Kaiserslautern, 2011.

- /SCH 12a/ Schäfer, T., Huber, F., Seher, H., Missana, T., Alonso, U., Kumke, M., Eidner, S., Claret, F., Enzmann, F.: Nanoparticles and their influence on radionuclide mobility in deep geological formations. Applied Geochemistry, Bd. 27, Nr. 2, S. 390–403, DOI 10.1016/j.apgeochem.2011.09.009, 2012.
- /SCH 12b/ Schlegel, R., Vymlatil, P., Will, J., Jobmann, M., Polster, M., Breustedt, M.: Parameteridentifikation von Tonsteinformationen in Untertagelaboratorien.
 Präsentation, Weimarter Optimierungs- und Stochastiktagen: Weimar, 2012.
- /SCH 17/ Schmidt, H. H., Buchmaier, R. F., Vogt-Breyer, C.: Grundlagen der Geotechnik, Geotechnik nach Eurocode. ISBN 9783658149314, Springer Fachmedien Wiesbaden, 2017.
- /SHA 13/ Shaw, R. P.: Gas Generation and Migration, International Symposium and Workshop. Proceedings: Luxembourg, 5th to 7th February 2013.
- /SHI 14/ Shiu, W., Billaux, D.: Numerical reproduction and sensitivity analysis of undrained triaxial test results. Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA), Nagra Arbeitsbericht, 14-86, 112 S.: Wettingen/Schweiz, April 2014.
- /SKB 10/ Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Buffer, backfill and closure process report for the safety assessment SR-Site. SKB Technical Report, TR-10-47, 361 S., 2010.
- /SMI 14/ Smith, I.: Elements of Soil Mechanics. Wiley-Blackwell, 2014.
- /SOU 11/ Souley, M., Armand, G., Su, K., Ghoreychi, M.: Modeling the viscoplastic and damage behavior in deep argillaceous rocks. Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C, Bd. 36, 17-18, S. 1949–1959, DOI 10.1016/j.pce.2011.10.012, 2011.
- /SOU 17/ Souley, M., Armand, G., Kazmierczak, J.-B.: Hydro-elasto-viscoplastic modeling of a drift at the Meuse/Haute-Marne underground research laboratoratory (URL). Computers and Geotechnics, Bd. 85, S. 306–320, DOI 10.1016/j.compgeo.2016.12.012, 2017.

- /STA 17/ Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz – StandAG) in der Fassung vom 5. Mai 2017 (BGBI. I 2017, Nr. 26, S. 1074-1100), zuletzt geändert 20. Juli 2017 (BGBI. I 2017, Nr. 52, S. 2808–2838).
- /TER 43/ Terzaghi, K.: Theoretical Soil Mechanics. Hrsg.: John Wiley & Sons, Inc., 526 S.: New York, 1943.
- /THU 99/ Thury, M., Bossart, P.: Results of the Hydrogeological, Geochemical and Geotechnical Experiments, Performed in 1996 and 1997. Mont Terri Rock Laboratory, Geologische Berichte, Nr. 23, 1999.
- /TOP 13/ Toprak, E., Mokni, N., Olivella, S., Pintado, X.: Thermo-Hydro-Mechanical Modelling of Buffer, Synthesis Report. POSIVA Oy, POSIVA, 2012-47, 120 S.: Olkiluoto, August 2013.
- /TOP 17/ Toprak, E., Olivella, S., Pintado, X.: Coupled THM modelling of engineered barriers for the final disposal of spent nuclear fuel isolation. Geological Society, London, Special Publications, Bd. 443, Nr. 1, S. 235–251, DOI 10.1144/SP443.19, 2017.
- /TRE 64/ Tresca, H.: Mémoire sur l'écoulement des corps solides soumis à de fortes pressions. C. R. Acad. Sci. Paris, Nr. 59, S. 754, 1864.
- /TUG 07/ TU Graz: Felsmechanik und Tunnelbau. Skriptum, 49 S.: Graz, 2007.
- /UNI 17/ Universidad Politécnica de Cataluña (UPC): CODE_BRIGHT, A 3-D program for thermo-hydro-mechanical analysis in geological media, Users Guide. Juni 2017.
- /WEH 06/ Wehnert, M.: Ein Beitrag zur drainierten und undrainierten Analyse in der Geotechnik. Universität Stuttgart - Instituts für Geotechnik, Mitteilung 53, ISBN 978-3-921837-53-5, 2006.

- /WEY 16/ Weyand, T., Kock, I.: Integritätsgefährdende Prozesse in internationalen Sicherheitskonzepten für die Wirtsgesteine Tonstein und Kristallin, Bericht zum Arbeitspaket 3, Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise. GRS-428, 71 S., ISBN 978-3-946607-10-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, September 2016.
- /WHE 95/ Wheeler, S. J., Sivakumar, V.: An elasto-plastic critical state framework for unsaturated soil. Géotechnique, Bd. 45, Nr. 1, S. 35–53, DOI 10.1680/geot.1995.45.1.35, 1995.
- /WIK 17a/ Wikipedia: Materialmodell. Stand vom 28. Mai 2017, erreichbar unter https://de.wikipedia.org/w/index.php?oldid=165873504, abgerufen am 8. Juni 2017.
- /WIK 17b/ Wikipedia: Rheologisches Modell. Stand vom 11. Juni 2017, erreichbar unter https://de.wikipedia.org/wiki/Rheologisches_Modell, abgerufen am 26. September 2017.
- /WIK 17c/ Wikipedia: Bruchkriterium. Stand vom 31. Mai 2017, erreichbar unter https://de.wikipedia.org/w/index.php?oldid=157812182, abgerufen am 14. Juni 2017.
- /WIK 18/ Wikipedia: Dilatanz (granulare Materie). erreichbar unter https:// de.wikipedia.org/wiki/Dilatanz_(granulare_Materie), abgerufen am 26. September 2018.
- /WIT 17/ Witt, K. J.: Grundbau-Taschenbuch, Teil 1, Geotechnische Grundlagen. 272 S., ISBN 9783433607244, Wiley, 2017.
- /WOL 96/ Wolffersdorff, P.-A. von: A hypoplastic relation for granular materials with a predefined limit state surface. Mechanics of Cohesive-frictional Materials, Bd. 1, Nr. 3, S. 251–271, DOI 10.1002/(SICI)1099-1484(199607)1:3<251:AID-CFM13>3.0.CO;2-3, 1996.

- /WOL 04/ Wolffersdorf, P. A. von: Ausgewählte Probleme bei der Berechnung von Stützkonstruktionen mit der Methode der Finiten Elemente. Hrsg.: Glückauf Essen, Baugrund Dresden, 697 – 699, 2004.
- /WOL 12/ Wolf, J., Behlau, J., Beuth, T., Bracke, G., Bube, C., Buhmann, D., Dresbach, C., Hammer, J., Keller, S., Kienzler, B., Klinge, H., Krone, J., Lommerzheim, A., Metz, V., et al.: FEP-Katalog für die VSG, Dokumentation, Bericht zum Arbeitspaket 7 - Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. GRS-283, 864 S., 2012.
- /WRI 01/ Wriggers, P.: Nichtlineare Finite-Element-Methoden. ISBN 978-3-540 67747-5, DOI 10.1007/978-3-642-56865-7, Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2001.
- /ZHA 04/ Zhang, C.-L., Rothfuchs, T., Moog, H. C., Dittrich, J., Müller, J.: Thermo-Hydro-Mechanical and Geochemical Behaviour of the Callovo-Oxfordian Argillite and the Opalinus Clay. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-202, ISBN 3-931995-69-0: Braunschweig, 2004.
- /ZHA 07/ Zhang, C.-L., Rothfuchs, T., Jockwer, N., Wieczorek, K., Dittrich, J., Müller, J., Hartwig, L., Komischke, M.: Thermal effects on the opalinus clay, A joint heating experiment of ANDRA and GRS at the Mont Terry URL (HE-D project). Final report, BMWA-Vorhaben, FKZ 02E9773. GRS-224, 196 S., ISBN 978-3-931995-98-0, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Braunschweig, 2007.
- /ZHA 10/ Zhang, C.-L., Czaikowski, O., Rothfuchs, T.: Thermo-hydro-mechanical behaviour of the Callovo-Oxfordian clay rock within the Framework of GRS/ANDRA Cooperation Programme and the EC TIMODAZ Project, Final report, BMWi-Vorhaben, FKZ 02E10045. GRS-266, 252 S., ISBN 978-3-939355-42-7, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Braunschweig, 2010.

- /ZHA 13/ Zhang, C.-L., Czaikowski, O., Rothfuchs, T., Wieczorek, K.: Thermo-Hydro-Mechanical Processes in the Nearfield around a HLW Repository in Argillaceous Formations, Volume I, Laboratory Investigations. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS - 312, ISBN 978-3-939355-91-5: Braunschweig, 2013.
- /ZHA 17a/ Zhang, C.-L.: Response of Clay Rock to Moisture Change. In: Ferrari, A., Lyesse, L. (Hrsg.): Advances in Laboratory Testing and Modelling of Soils and Shales (ATMSS). International Workshop "Advances in Laboratory Testing & Modelling of Soils and Shales", Villars-sur-Ollon, 18-20 January 2017, Springer, 2017.
- /ZHA 17b/ Zhang, C.-L.: Sealing Performance of Fractured Claystone and Clay-Based Materials, within the Framework of the German Project THM-TOM and the EC Project DOPAS, Final Report. Gesellschaft f
 ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-451, 228 S., ISBN 978-3-946607-38-0: Braunschweig, März 2017.
- /ZHA 17c/ Zhang, C.-L.: Sealing Performance of Fractured Claystone and Clay-Based Materials, within the Framework of the German Project THM-TON and the EC Project DOPAS (Final Report). Gesellschaft f
 ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS, Nr. 451, 237 S., März 2017.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Schichtstruktur eines quellfähigen Dreischicht-Tonminerals (verändert nach /NIX 03/)	11
Abb. 2.2	Gekoppelte THM-Prozesse im Nahfeld eines Einlagerungsbohrloches, vor (links) und nach (rechts) der Einlagerung eines Endlagerbehälters /ZHA 13/	15
Abb. 2.3	Spannungszustand in einem repräsentativen gesättigtem Tonvolumen /ZHA 13/	24
Abb. 2.4	Spannungs-Verformungsverhalten während eines Triaxialversuchs von Tonstein (COx Tonstein) aus /ZHA 10/	26
Abb. 2.5	(a) Axialspannung σ ₁ und (b) volumetrische Deformation V/V ₀ als Funktion der axialen Verformung aus Triaxialversuchen für Opalinuston mit unterschiedlichen Wassergehalten /NAG 01/	27
Abb. 2.6	a) innerkristalline Quellung mit der Einlagerung von Wassermolekülen und dem b) Prinzip der osmotischen Quellung (verändert nach /NIX 03/)	31
Abb. 2.7	Schematische Darstellung der zeitabhängigen Degradation der Bentonit-Verfüllung zu einem Zeitpunkt lange nach Verfüllung/Verschluss der BE/HAA-Lagerstollen (aus /NAG 14a/)	36
Abb. 2.8	Schema der alkalischen Störung in COx Tonen um die Streckenkontur bzw. dem Streckenausbau bei 100.000 Jahren /AND 05a/	37
Abb. 3.1	Schematische Darstellung der verschiedenen Begriffe eines Gesteinsgefüges /NEU 64/	42
Abb. 3.2	Schematische Darstellung der THM-Kopplung und deren Wechselwirkung (verändert nach /ZHA 10/)	46
Abb. 3.3	Beispiele für das Bruchverhalten von Fels: a) spröd mit Entfestigung, b) duktil mit Entfestigung, c) duktil und ideal-plastisch und d) duktil mit Verfestigung /WIT 17/	48
Abb. 3.4	Beispielhaftes Spannungs-, Verformungs- und Dilatanz-Verhalten von Tonstein im Festigkeitsversuch (COx-Tonstein) aus /ZHA 10/	50
Abb. 3.5	Unterteilung der elastischen Stoffmodelle	56
Abb. 3.6	Unterteilung der (elasto)plastischen Stoffmodelle	56

Abb. 3.7	Elemente, die in eindimensionalen visko-elasto-plastischen Modellen verwendet werden. a) Stoßdämpfer, b) Feder, c) Gleitelement verändert nach /WIK 17b/	57
Abb. 3.8	Rheologisches Modell mit den zugehörigen charakteristischen Parametern G = elastisches Schermodul, B = Kompressionsmodul, η = Viskositätskoeffizient, c = Kohesion, Φ = innerer Reibungswinkel, ψ = Dilatationswinkel /FAH 15/	57
Abb. 3.9	a) elastisch, b) ideal elastisch, c) plastisch, d) ideal linear elastisch /WIK 17a/	59
Abb. 3.10	Links ist die Grenzbedingung nach Mohr-Coulomb im Hauptspannungsraum dargestellt. Rechts ist die Ebene der deviatorischen Spannung dargestellt /NIE 17/	61
Abb. 3.11	Das modifizierte Cam-Clay-Modell a) Darstellung in $p' - q$ – Ebene b, c) Kompressions- bzw. Verfestigungsverhalten im natürlichen bzw. halblogarithmischen Maßstab /SCH 17/	66
Abb. 3.12	Zonenbasierte Matrix und Ubiquitous-Joint-Eigenschaften (modifiziert nach /SAI 08/ zitiert in /SAI 17/)	69
Abb. 3.13	a) eine analytische Lösung von /JAE 60/ für die Wirkung einer einzigen gemeinsamen Schwächeebene b) Vergleich der einaxialen Druckfestigkeitswerte - Ubiquitous-Joint-Modell versus analytische Lösung c) Typische Festigkeits-Anisotropie-Kurven für Proben mit Einzel-, einem Satz und zwei Diskontinuitäten (/AL- 98/ modifiziert nach /HOE 80/, zitiert in /SAI 17/)	70
Abb. 3.14	Allgemeine Kriechkurve nach /PRI 64/ verändert durch /HEL 11/	74
Abb. 3.15	a) Maxwell-Modell (serielle Schaltung), b) Kelvin-Voigt Körper (parallele Schaltung), c) Bingham-Hooke Modell (Dämpfungselement wird erst bei $ \sigma > \sigma_{max}$ aktiviert /NIE 17/	75
Abb. 3.16	Für vier Zonen werden unterschiedliche Reibungswinkel angenommen	81
Abb. 3.17	Schematische Darstellung der Grenzzustandsbedingungen eines isotropen Geomaterials im Zustandsraum e - p' - q /MAR 14/	84
Abb. 3.18	Zusammenstellung der Modellierungswerkzeuge und der berücksichtigten Mechanismen für die bau- und sicherheitstechnischen Anwendungen für die Etappe 2 des Sachplanverfahrens /MAR 14/	85

Abb. 3.19	Dreidimensionale Darstellung der Versagensfläche im thermo-elasto-	
	plastischen BBM (/GEN 95/)	88

Abb. B 1	Kapillardruck-Sättigungsbeziehung (Bohrung Benken und Felslabor		
Mont Terri). In grauer Farbe ist die Bandbreite der für das			
schweizerische Wirtsgestein im Zürcher Weinland empfohlenen			
	Kapillardruck-Sättigungsbeziehung auf Basis des Van-Genuchten		
	Parametermodells hervorgehoben /JAH 16/	154	
Abb. B 2	Vergleich der einaxialen Druckfestigkeiten verschiedener Tonsteine		
	in Abhängigkeit des Wassergehalts /MAR 14/	159	

Abb. C 1	Dilatanz im Scherversuch an einer Kugelpackung aus /BEN 17/	. 164
Abb. C 2	Reibungswinkel im Bezug zur Normal- und Scherbeanspruchung	404
	/SMI 14/	. 164
Abb. C 3	Schematische Darstellung der Fließregel	. 165

Tabellenverzeichnis

Tab. 1.1	Vergleich des Wertebereiches wichtiger Materialparameter (nach /KUD 13/)7
Tab. 3.1	Die Abbildung zeigt eine Zusammenfassung der berücksichtigten Prozesse in dem Stoffmodell nach Souley /SOU 17/91
Tab. 4.1	Zusammenstellung von unterschiedlichen Ansätzen zur Berücksichtigung des Kriechverhaltens von Tonstein97
Tab. A 1	Konstitutive Modelle in FLAC3D – Version 6 /ITA 18/132
Tab. A 2	Mechanische Stoffmodelle für CODE_BRIGHT /UNI 17/143
Tab. B 1	Zweiphasenflussparameter für den Opalinuston aus nordschweizerischen Lokalitäten /JAH 16/,/GAU 02/155
Tab. B 2	Visko-elastische Kriechraten /JAH 16/ 160

A Konstitutive Modelle in verschiedenen Programmen

Die in den vorherigen Kapiteln erfolgte Sachstandserhebung zu Prozessen in Tonsteinen und Stoffmodellen, soll zur Entscheidungsfindung eines geeigneten Materialmodells oder zur Entwicklung/Anpassung von Materialmodellen beitragen. Im Zuge dessen wird in diesem Kapitel eine Zusammenstellung von Rechenprogrammen, hinsichtlich des Vorhandenseins der erforderlichen und/oder weiterzuentwickelnden Materialmodelle gegeben. Die im Folgenden vorgestellten Rechenprogramme enthalten alle die grundlegenden Materialmodelle zur Modellierung des (hydro)geomechanischen Verhaltens von Tonstein.

Nach /BEN 17/ kann festgestellt werden, dass:

"Der Stand der Technik im Bereich geotechnischer Materialmodellierung, weit hinter den Stand der Wissenschaft zurückfällt; die Innovationskraft der Anbieter von FE-Software im Bereich der Materialmodellierung ist gering. Wissenschaftlich anerkannte Konzepte, wie z. B. von Zustandsgrößen abhängige Dilatanzformulierungen, Strukturtensoren, verbesserte Versagenskriterien oder Modellformulierungen außerhalb der Elastoplastizitätstheorie finden nur in sehr geringem Umfang Eingang in die Ingenieurpraxis. Ursachen hierfür sind vermutlich:

- Mangelnde Nachfrage auf Seiten der Anwender von Materialmodellen, da die Vorteile verbesserter Modelle nicht erkannt oder wertgeschätzt werden bzw. den Aufwand für die Bestimmung zusätzlicher Materialparameter augenscheinlich nicht rechtfertigen,
- mangelndes Interesse der Modellentwickler an der Kommerzialisierung von Modellen, manifestiert z. B. in der Wahl (physikalisch) nicht greifbarer Materialparameter,
- mangeInde Schulung/ Ausbildung im Bereich Materialmodellierung."

Nach einer Durchsicht von implementierten Modellen gängiger Software, ist festzustellen, dass verständlicherweise die jeweiligen Modelle immer für bestimmte Fragestellungen (bautechnische Fragestellungen, THM-Fragestellungen im Rahmen der Langzeitsicherheit, geowissenschaftliche Systemanalysen, Verhalten des Wirtsgesteins) entwickelt wurden. Meistens basieren die Modelle auf dem Versagenskriterium von Mohr-Coloumb. Ein umfassendes Materialmodell für alle Fragestellungen gibt es nicht.

A.1 FLAC3D Version 6.0 /ITA 18/

FLAC3D (Fast Lagrangian Analysis of Continua in 3 Dimensions) ist eine numerische Modellierungssoftware für geotechnische Analysen von Böden, Gestein, Grundwasser und Bauteilen. FLAC3D verwendet eine explizite Finite-Volumen-Methode. Zudem können eigene benutzerdefinierte Stoffmodelle für den Einsatz in FLAC3D programmiert werden. Das Modell muss in C++ geschrieben und als DLL-Datei kompiliert werden. Zudem beinhaltet die Version 6.0 eine Python Schnittstelle mit der in Python erstellte Skripte ausgeführt werden können und FLAC3D mit Python gesteuert werden kann.

In FLAC3D kann das mechanische, hydraulische und thermische Verhalten gekoppelt berücksichtigt werden. Es können keine unterschiedlichen konstitutiven Modelle miteinander gekoppelt werden. Die mechanischen und hydraulischen Eigenschaften können für gewisse Parameter temperaturabhängig gemacht werden, indem über FISH (interne Programmiersprache) auf Temperatur- und Eigenschaftswerte zugegriffen wird. Es werden keine Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung und keine Kapillareffekte aufgrund mechanischer Deformationen berücksichtigt. Laut Handbuch kann durch eine HM-Kopplung die Mechanik in Abhängigkeit vom Porendruck gemacht werden. Eine Anpassung der Permeabilität kann durch FISH-Funktionen implementiert werden.

A.1.1 Anwendung von Stoffmodellen in FLAC3D

Im Folgenden sind beispielhaft Projekte aufgeführt in denen FLAC3D für T(H)(M)-Modellrechnungen herangezogen wurde.

- GENESIS /AME 07/ → SUBI Modell:
 Es wurden thermische Auslegungsberechnungen für Opalinuston durchgeführt.
- NAGRA NAB_14-02 /MAR 14/ bzw. NAB_14-81 /NAG 14b/ → SUBI Modell: Sensitivitätsstudien zur Auslegung der Untertagebauwerke in Bezug auf die maximale Tiefenlage und den Platzbedarf.
- Souley /SOU 17/, eigens entwickeltes Modell mit Kriechen: Implementierung eines elastisch-visko-plastischen Modells. Untersuchungen zum Verständnis des mechanischen und hydromechanischen Verhaltens von COx-Tonsteinen und der Modifikation der mechanischen und hydraulischen Eigenschaften in der EDZ (Excavation Damage Zone).

In FLAC3D sind neunzehn Standardmodelle zur Modellierung des geomechanischen elastischen und plastischen Verhaltens von Materialien implementiert. Diese sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst.

Tab. A 1	Konstitutive Modelle in FLAC3D – Version 6 /ITA 18/	1

Model	Description and Representative Material	Example Application
Elastic, isotropic Model	homogeneous, isotropic continuum; linear stress-strain behavior	manufactured materials (e.g., steel) loaded below strength limit; factor-of-safety calculation
Elastic, orthotropic Model	materials with three mutually perpendicular planes of elastic symmetry	columnar basalt loaded below strength limit
Elastic, transversely Isotropic Model	thinly laminated material exhibiting elastic anisotropy (e.g., slate)	laminated materials loaded below strength limit
Drucker-Prager	limited application; soft clays with low friction angles	common model for comparison to implicit finite- element programs
Mohr-Coulomb	loose and cemented granular materials; soils, rock, con- crete	shear yielding in soils and rocks, general soil or rock mechanics (e. g., slope stability and underground excavation)
Ubiquitous-joint	thinly laminated material exhibiting strength anisotropy (e.g., slate)	an anisotropic plasticity model that includes weak planes of specific orientation embedded in a Mohr- Coulomb solid (excavation in closely bedded strata)
Ubiquitous- Anisotropic (Caniso) model	thinly laminated material	elastic and yielding behavior of layered (laminated) materials
strain- hardening/softening Mohr-Coulomb	granular materials that exhibit nonlinear material harden- ing or softening, variations of the Mohr-Coulomb model properties (cohesion, friction, dilation, tensile strength) as functions of plastic strain	studies in post-failure (e.g., progressive collapse, yielding pillar, caving)

Model	Description and Representative Material	Example Application
bilinear strain- hardening/softening ubiquitous-joint	laminated materials that exhibit nonlinear material harden- ing or softening behavior for the matrix and the weak plane based on prescribed variations of the matrix and ubiqui- tous-joint model properties (cohesion, friction, dilation and tensile strength) as functions of plastic strain	studies in post-failure of laminated materials
double-yield	materials in which there may be significant irreversible compaction in addition to shear yielding	hydraulically placed backfill, lightly cemented gran- ular material.
Modified Cam-Clay model	materials with the influence of volume change on bulk property and resistance to shear need to be taken into con- sideration	geotechnical construction on soft clay
Hoek-Brown model	nonlinear yield surface, the model is based on the relation between the major and minor principal stresses. The model incorporates a plasticity flow rule that varies as a function of the confining stress level	geotechnical construction in rock mass
Modified Hoek-Brown	stress-dependent plastic flow rule, post-failure plastic flow using a choice of simple flow rules given in terms of a user- specified dilation angle, tensile strength limit similar to that used by the Mohr-Coulomb model	geotechnical construction in rock; factor-of-safety calculation
Cap-Yield (CYSoil) Model	a cap hardening law, to capture the volumetric power law behavior observed in isotropic compaction tests; a friction- hardening law, to reproduce the hyperbolic stress-strain law behavior observed in drained triaxial tests; and a compac- tion/dilation law to model irrecoverable volumetric strain taking place as a result of soil shearing.	excavation, tunnel, slope stability, embankment, foundation analysis
CHSoil model	friction-hardening law that uses hyperbolic model parame- ters as direct input, and a Mohr-Coulomb failure envelope with two built-in dilation laws	as an alternative to Duncan and Chang model in soil mechanics problems.

Model	Description and Representative Material	Example Application
Plastic-Hardening	hyperbolic stress-strain relationship during axial drained compression (while unlodaing/reloading is elastic) and stress-dependent stiffness described by a power law, shear and volumetric hardening laws and adopts Mohr-Coulomb failure criterion	geotechnical construction in soils. The model is well established for soil structure interaction prob- lems, excavations, tunneling and settlements anal- ysis, etc.
Swell Model	based on the Mohr-Coulomb constitutive model. The differ- ence is that the wetting-induced deformations are taken in- to account by coupling the assumed wetting strains with the model state prior to wetting	application on soils which wetting-induced defor- mations are significant
Mohr-Coulomb- Tension	assumes that a zone can have up to three mutually per- pendicular cracks	mining, underground excavation studies, with con- servative estimate of surface settlement.

A.1.2 Elastische Modelle

Elastisch, isotropes Model

Das elastische, isotrope Modell ist die einfachste Darstellung eines Materialverhaltens. Dieses Modell gilt für homogene, isotrope, kontinuierliche Materialien, die ein lineares Spannungs-Dehnungs-Verhalten ohne Hysterese bei Druckentlastung aufweisen. Beispielanwendungen: Boden, Gestein, gefertigtes Material wie Stahl, das unterhalb der Festigkeitsgrenze belastet wird.

Elastisches, orthotropes Model

Das elastische, orthotrope Modell repräsentiert Materialien mit drei zueinander senkrechten (orthogonalen) Ebenen der elastischen Symmetrie. Beispielanwendungen: säulenartiger Basalt unterhalb seiner Festigkeitsgrenze.

Elastisch, transversal isotropes Model

Das elastisch, transversal isotrope Modell gibt die Möglichkeit, geschichtete elastische Medien zu simulieren, deren Elastizitätsmodule sich in normaler und paralleler Richtung zu den Schichten deutlich unterscheiden. Beispielanwendungen: laminierte Materialien, unterhalb der Festigkeitsgrenze belastet

A.1.3 Plastische Modelle

Drucker-Prager Model

Das Drucker-Prager-Plastizitätsmodell kann nützlich sein, um weiche Tone zu modellieren. Dieses Modell wird jedoch nicht allgemein für die Anwendung auf geologische Materialien empfohlen. Es ist hier hauptsächlich enthalten, um einen Vergleich mit anderen numerischen Programmergebnissen zu ermöglichen.

Mohr-Coulomb Model

Das Mohr-Coulomb-Modell ist das gebräuchlichste Modell, zur Modellierung des Scherversagens in Böden und Gesteinen. Vermeer und deBorst (1984) berichten bei-
spielsweise über Labor-Testergebnisse für Sand und Beton, die mit dem Mohr-Coulomb-Kriterium übereinstimmen. Beispielanwendungen: allgemeine Boden- oder Felsmechanik für Hangstabilität und unterirdische Hohlräume, allgemeine Boden- oder Felsmechanik.

Ubiquitous-joint Model

Das ubiquitous-joint Modell ist ein anisotropes Plastizitätsmodell. Es erlaubt die Simulation einer Kluft- bzw. Trennflächenschar mit abweichenden Festigkeitskennwerten, welche in einen Mohr-Coulomb-Festkörper eingebettet sind.

Ubiquitous-Anisotropisches (Caniso) Model

Dieses ubiquitous joint Modell mit anisotroper (transversaler isotroper) Elastizität simuliert das Vorhandensein einer orientierten Schwächezone. Die Schwächezone hat die gleiche Orientierung wie die Ebene der elastischen Isotropie. Das Kriterium für das Versagen auf der Ebene, dessen Orientierung gegeben ist, besteht aus einem Coulomb-Kriterium mit Spannungsabschaltung. Dieses Modell kann bei der Simulation des elastischen und nachgiebigen Verhaltens von geschichteten (laminierten) Materialien nützlich sein.

Strain-hardening/softening Model

Das **Strain-hardening/softening** Model ermöglicht die Modellierung des nichtlinearen Verfestigungs-/Entfestigungsverhaltens auf der Grundlage vorgeschriebener Variationen der Mohr-Coulomb-Modelleigenschaften (Kohäsion, Reibung, Dilatanz, Zugfestigkeit) als Funktionen der deviatorischen Dehnung.

Bilinear strain-hardening/softening ubiquitous-joint Model

Das Strain-hardening/softening ubiquitous-joint Model ermöglicht die Darstellung des Materialerweichungs- und Festigungssverhaltens für die Matrix und eine Schwächezone auf der Grundlage vorgeschriebener Variationen der ubiquitous-joint Modelleigenschaften (Kohäsion, Reibung, Dilatatanz und Zugfestigkeit) als Funktionen von deviatorischer und plastischer Zugdehnung. Die Variation der Materialfestigkeitseigenschaften mit mittlerer Spannung kann auch durch die Verwendung der bilinearen Option berücksichtigt werden (Untersuchungen zum Versagen von laminierten Materialien).

Double-yield Model

Das Double-yield Modell soll Materialien simulieren, in denen es eine signifikante irreversible Verdichtung zusätzlich zum Scherversagen geben kann, wie z. B. für einen Streckenversatz oder leicht zementierte granulare Materialien.

Modified Cam-clay Model

Das modifizierte Cam-Clay-Modell ist ein inkrementelles Verfestigungs-/Entfestigungs, elastoplastisches Modell. Seine Eigenschaften umfassen eine besondere Form der nichtlinearen Elastizität und ein Verfestigungs-/Entfestigungsverhalten, das durch volumetrische plastische Dehnung ("Dichte" angetrieben) bestimmt wird. Die Bruchkriterien sind in ihrer Form selbst ähnlich und entsprechen den Ellipsoiden der Drehung um die mittlere Spannungsachse im Hauptspannungsraum. In diesem Modell wird keine Widerstandsfähigkeit gegen Zugspannung berücksichtigt. Siehe u. a. Roscoe und Burland /ROS 68/ für detaillierte Informationen über das modifizierte Cam-Clay-Modell.

Hoek-Brown model

Das Hoek-Brown-PAC-Model bietet die Möglichkeit eine Änderung des Bruchkriteriums zu berücksichtigen. Dieses Modell funktioniert gut bei höheren Begrenzungsspannungszuständen, kann aber eine übermäßige Dilatanz bei geringem Einschluss oder unter Zugspannungsbedingungen erzeugen. Die hier beschriebene alternative Version wird so modifiziert, dass sie ein Zugbruch-Kriterium enthält und dem Benutzer auch erlaubt, einen Dilatanzwinkel als Eingabeparameter anzugeben. Das Hoek-Brown-Modell wird direkt aus dem Mohr-Coulomb-Modell abgeleitet.

Für jeden relevanten Problemparameter kann ein "Faktor der Sicherheit" -Index definiert werden, indem das Verhältnis des berechneten Parameterwertes unter gegebenen Bedingungen zum kritischen Wert des Parameters genommen wird, bei dem sich der Beginn eines nicht akzeptablen Ergebnisses manifestiert.

Modified Hoek-Brown Model

Das Hoek-Brown-Bruchkriterium ist ein empirisches Model, das die Spannungsbedingungen charakterisiert, die zum Versagen in intakten Felsen- und Gesteinsmassen führen. Alternativ dazu wurde eine gleichwertige Reibung und Kohäsion mit einem MohrCoulomb-Modell verwendet, das auf die nichtlineare Hoek-Brown-Festigkeitsumhüllung bei bestimmten Spannungsniveaus abgestimmt ist.

Numerische Lösungsmethoden erfordern vollständige konstitutive Modelle, welche Spannung mit der Dehnung in Bezug setzen. Zusätzlich zum Versagenskriterium ist auch eine "Flussregel" notwendig, um eine Beziehung zwischen den Komponenten der Dehnungsrate beim Ausfall zu schaffen. Es gab mehrere Versuche, ein vollständiges konstitutives Modell aus dem Hoek-Brown-Kriterium zu entwickeln. Diese Formulierungen gehen davon aus, dass die Flussregel eine feste Beziehung zum Versagenskriterium hat und dass die Flussregel isotrop ist, während das Hoek-Brown-Kriterium dies nicht ist. In dem in FLAC3D implementierten Model gibt es keine feste Form für die Strömungsregel. Es wird davon ausgegangen, dass sie von dem Spannungsniveau und möglicherweise einer gewissen Schädigung abhängt.

Das Bruchkriterium wird als Bruchfläche angenommen, wobei die Terminologie der Plastizitätstheorie verwendet wird. Normalerweise wird ein Versagenskriterium als eine feste, begrenzende Belastungsbedingung angenommen, die dem endgültigen Ausfall des Materials entspricht. Jedoch erlauben numerische Simulationen von elastoplastischen Materialien die Fortsetzung der Lösung, nachdem ein "Versagen" stattgefunden hat, und die Fehlerbedingung selbst kann sich ändern, wenn die Simulation fortschreitet (entweder durch Ver- oder Entfestigung). In diesem Fall ist es vernünftiger, von "Nachgeben" als Versagen zu sprechen. Es gibt keine implizite Einschränkung der Art des Verhaltens, das modelliert wird. Sowohl das duktile als auch das spröde Verhalten können in Abhängigkeit von der verwendeten Annahme dargestellt werden.

Cap-Yield (CYSoil) Model

Dieses Modell ist ein dehnungshärtendes konstitutives Modell für Böden, die durch eine Reibungs- und zusammenhängende Mohr-Coulomb-Scherhülle und eine elliptische volumetrische Kappe gekennzeichnet ist, die mit einem Formparameter verbunden ist.

Zu den Modellmerkmalen gehören:

- ein (Cap)Verhärtungsgesetz, um das in isotropen Verdichtungstests beobachtete volumetrische Spannungsverhalten zu erfassen,
- Ein Reibungsverhärtungsgesetz, um das hyperbolische Spannungs-Dehnungs-Verhalten zu reproduzieren, das bei entwässerten triaxialen Tests beobachtet wird,
- Und ein Verdichtungs-/Dilatationsgesetz zur Modellierung einer volumetrischen Belastung, die durch Bodenscherung stattfindet.

Simplified Cysoil model

Eine vereinfachte Version des CYSoil-Modells ohne volumetrische Kappe (Cap), das so genannte CHSoil-Modell, bietet eingebaute Features, darunter ein Reibungshärtungsgesetz, das hyperbolische Modellparameter als direkte Eingabe verwendet und eine Mohr-Coulomb-Versagenshülle mit zwei eingebauten Dilatanz Gesetzen. Anwendungsbeispiel: als Alternative zum Duncan und Chang Modell bei Bodenmechanik Problemen.

Plastic Hardening Model

Das Plastic Hardening (PH)-Modell ist ein Härtungsmodell für die Simulation des Bodenverhaltens. Das Modell zeichnet sich durch eine hyperbolische Spannungs-Dehnungs-Beziehung bei axialer, drainierter Kompression aus (während das Be- und Entlasten elastisch ist) und eine stressabhängige Steifigkeit, die durch ein Spannungsgesetz beschrieben wird. Es schließt auch Scher- und volumetrische Härtungsgesetze mit ein und berücksichtigt das Mohr-Coulomb-Versagenskriterium. Das Modell ist einfach zu kalibrieren, mit konventionellen Labor oder in situ Tests. Anwendungsbeispiele: geotechnische Konstruktionen in Böden, das Modell ist gut etabliert für Interaktionen in Bodenstrukturen, Ausgrabungen, Tunnel- und Siedlungs-Analyse, etc.

Mohr-Coulomb-Tension (MOHRT) Model

Dieses Modell erfordert die gleichen Materialparameter wie das herkömmliche Mohr-Coulomb-Modell. Es geht davon aus, dass eine Zone bis zu drei zueinander senkrechte Risse haben kann. Jeder Riss schneidet ganz durch eine Zone. Wenn die Zugfestigkeit (die anfangs isotrop ist) überschritten wird, wird ein Riss senkrecht zur Hauptzugspannung gebildet. Die Zugfestigkeit (die anisotrop wird) senkrecht zum Riss, wird durch sofortige Entfestigung auf null gesetzt.

Nachdem der Riss geschlossen ist, verhält sich das Modell so, als wäre der Riss nicht vorhanden, außer dass die Zugfestigkeit senkrecht zum Riss Null ist. Anwendungsbeispiele: Bergbau, unterirdische Hohlraumstudien mit konservativer Schätzung der Oberflächensetzung.

Quell-Modell

Das Quellmodell basiert auf dem Mohr-Coulomb-Modell. Der Unterschied besteht darin, dass die benetzungsinduzierten Deformationen berücksichtigt werden, indem die angenommene Feuchtigkeitsdehnung mit dem Modellzustand vor dem Benetzen verbunden wird. Die benetzungsinduzierte Dehnung folgt einer logarithmischen oder linearen Funktion der normierten Druckspannung in den (benutzerdefinierten) Quellrichtungen. Anwendungsbeispiel: Bodenquellung durch Nässe.

A.1.4 Kriechoption

Diese FLAC3D-Option kann verwendet werden, um das Verhalten von Materialien zu simulieren, die Kriechen aufweisen (d. h. zeitabhängiges Materialverhalten). Es gibt neun Materialmodelle mit der Creep-Option.

- 1. Maxwell-Modell ein klassisches visko-elastisches Modell, bekannt als Maxwell-Substanz.
- Burgers-Modell ein klassisches visko-elastisches Modell, bekannt als die Burgers-Substanz, die aus einem Kelvin-Modell und einem Maxwell-Modell zusammengesetzt ist.
- Potenz-Modell ein Zwei-Komponenten-Potenz-Modell f
 ür Bergbau Anwendungen (z. B. Salz- oder Kali-Bergbau).
- 4. WIPP-Modell ein Kriech-Modell, das häufig in thermomechanischen Analysen verwendet wird, die mit Studien für die unterirdische Isolierung von nuklearen Abfällen in Salz verbunden sind.
- 1. Burgers-Mohr-Modell ein visko-plastisches Modell, das das Modell der Burgers und des Mohr-Coulomb-Modells kombiniert.

- 2. Potenz-Mohr-Modell ein visko-plastisches Modell, das das Zweikomponenten-Potenz-Modell und das Mohr-Coulomb Modell kombiniert.
- 3. Potenz-Ubiquitous-Modell ein visko-plastisches Modell, das das zwei Komponenten Potenzmodell und das Ubiquitous-Joint-Modell kombiniert.
- 4. WIPP-Drucker-Modell ein visko-plastisches Modell, das das WIPP-Modell und das Drucker-Prager-Modell kombiniert.
- WIPP-Salt-Modell ein visko-plastisches Modell, modifiziert vom WIPP-Modell, und schließt ein volumetrisches und deviatorisches Verdichtungsverhalten f
 ür salzartige Materialien ein.

A.2 COMSOL /COM 15/, /COM 18/

COMSOL Multiphysics ist eine universelle Softwareplattform, für die Modellierung und Simulation von physikalischen Problemen. Die kommerzielle Softwareplattform beinhaltet mehr als 30 Add-on-Produkte, mit denen die Simulationsplattform mit dedizierten Physik-Schnittstellen und Werkzeugen für elektrische, mechanische, Strömungs und chemische Anwendungen weiter ausgebaut werden kann. Zusätzliche Schnittstellenprodukte verbinden COMSOL Multiphysics Simulationen mit CAD- und ECAD-Software.

Die konstitutiven Modelle des Strukturmechanikmoduls umfassen lineare elastische und viskoelastische Materialmodelle sowie orthotrope Materialien und Materialien mit Dämpfung. Die integrierten Materialmodelle können durch Hinzufügen des nichtlinearen Strukturmaterial- und des Geomechanikmoduls erweitert werden, die die Analyse von plastischen Dehnungsverformungen, hyperelastischen Materialien, Plastizität, Kriechen, Viskoplastizität für Gesteine, Beton und Boden ermöglichen.

Zusätzlich zu den vordefinierten, eingebauten Plastizitätsmodellen können benutzerdefinierte Versagensfunktionen erstellt werden. Diese können entweder direkt, durch die Manipulation der Physik-Schnittstellen im Geomechanik-Modul oder durch die Physik-Schnittstelle in COMSOL Multiphysics erstellt werden. User-codierte Subroutinen sind nicht erforderlich, da man einfach die konstitutiven Gleichungen im entsprechenden Editierfeld innerhalb der Schnittstellen eingeben kann. Diese können mathematische Ausdrücke der Feldvariablen und Spannungs- und Dehnungsinvarianten beinhalten. Zum Beispiel muss das Elastizitätsmodul nicht konstant sein, sondern kann eine Funktion jeder Feldvariablen und seiner Ableitungen sein. Materialeigenschaften können in Raum oder Zeit variieren oder mit komplexen Ausdrücken beschrieben werden. Wenn das Materialmodell von einer anderen Variablen abhängig ist, z. B. einem berechneten Temperaturfeld oder Wasserdruck, kann es direkt in diese Materialdefinitionen integriert werden. Auf diese Weise können die bereitgestellten Materialmodelle innerhalb des Geomechanikmoduls auch auf eine allgemeinere Materialklasse angepasst und erweitert werden.

Das Geomechanik-Modul lässt sich mit Analysen und deren Beschreibung von Variablen aus anderen Modulen in COMSOL kombinieren. Dazu gehören insbesondere physikalische Schnittstellen, die den porösen Fluidfluss, die Porenelastizität und den Stofftransport beschreiben, die im Subsurface Flow Modul enthalten sind.

A.3 CODE_BRIGHT

Das Programm CODE_BRIGHT (COupled DEformation BRIne, Gas and Heat Transport) wurde am Institut für Geotechnik und Geowissenschaften der Polytechnischen Universität Katalonien (UPC) entwickelt. Ursprünglich wurde das Programm zur geomechanischen Modellierung von salinen Materialien entwickelt. Danach wurde das Programm weiterentwickelt, um auch gekoppelte thermo-hydro-mechanische Prozesse in geologischen Medien modellieren zu können. Der theoretische Ansatz besteht aus einem Satz von Gleichungen zur Bestimmung der Primärvariablen, einem Satz konstitutiver Modelle und einem speziellen Berechnungsansatz. Der Code ist in FORTRAN geschrieben und besteht aus mehreren Unterprogrammen. Das Programm verwendet keine externen Bibliotheken /UNI 17/.

CODE_BRIGHT wird zusammen mit dem kommerziellen Pre/Post-Prozessor GiD-System verwendet. GiD wird vom Internationalen Zentrum für numerische Methoden der Ingenieurwissenschaften (CIMNE) entwickelt. GiD ist eine interaktive grafische Benutzeroberfläche, die für die Vorbereitung und Visualisierung aller Daten in Bezug auf numerische Simulationen verwendet wird. Diese Daten beinhalten die Information der Geometrie, Materialien, Randbedingungen, Lösungsinformationen und anderer Parameter. Das Programm kann auch das Finite-Elemente-Gitter erzeugen und die Informationen für ein numerisches Simulationsprogramm in seinem adäquaten Format für CODE_BRIGHT schreiben. Es ist auch möglich, die numerische Simulation direkt aus dem System auszuführen und die daraus resultierenden Informationen ohne Übertragung von Dateien zu visualisieren. Alle Materialien, Bedingungen und Lösungsparameter können auch auf der Geometrie definiert werden, ohne dass der Benutzer Kenntnis vom Modellgitter hat. Das Meshing wird durchgeführt, sobald das Modell vollständig definiert ist. Die Vorteile hierfür sind, dass mit Hilfe von assoziativen Datenstrukturen Modifikationen an der Geometrie vorgenommen werden können und alle anderen Informationen automatisch aktualisiert werden (für weitere Informationen siehe /UNI 17/)

In dem Programm Code-Bright sind konstitutive Modelle für hydraulische thermische und mechanische Fragestellungen implementiert (Tab. A 2). Die Phaseneigenschaften können für die Fest-, Flüssig- und Gasphase getrennt definiert werden. In der Tab. A 2 sind nur die mechanischen Modelle aufgeführt.

Hauptgruppe	Beschreibung		
Elastizität (Elastic parameters (linear elastici- ty model). Linear elasticity with pa-	Linear elasticity model		
	Bilinear elasticity model		
can be variable.)	Elasticity law - Zero thickness element		
Elastizität (thermische und Porenwasserbed- ingungen)	Linear expansion coefficients induced by tem- perature and suction changes		
Nichtlineare Elastizität	Volumetric strain is calculated in a reversible way		
	Nonlinear elasticity model with micro-macro in- teraction		
	Volumetric strain is calculated in a reversible way with two independent coupling terms		
Viskoelastizität für saline Materi- alen	Parameters for linear viscous deformation mode		
Viskoelastizität für saline Materi- alen	Creep of porous salt aggregates (nonlinear dependences on stresses)		
Viskoplastizität für granulare Mate- rialien (Viscosity can be written as a funciton of temperature)	Yield function and flow rule		
	Yield function and flow rule. Cam-clay		
	Yield function and flow rule. Mohr-Coulomb		
	Yield function and flow rule. For rock salt with di- latancy		

Hauptgruppe	Beschreibung		
Viskoplastizität für ungesättigte Böden, basiernd auf BBM	Viscoplasticity (general model for unsaturated soils based on Desai and Perzyna theory).		
	Parameters for viscoplasticity		
	Viscoplasticity - Zero thickness element		
Viskoplastizität für ungesättigte Böden, basiernd auf BBM	Parameters for yield function and plastic poten- tial		
	Viscoplasticity - Zero thickness element		
Viskoplastizität für ungesättigte Böden, basiernd auf BBM	Parameters for LC curve		
	Parameters for LC curve for rockfill materials		
	Parameters for LC curve for rockfill materials		
	Viscoplasticity - Zero thickness element		
	Damage orthotropic elastic model for the bonded material (1:linear damage law; 2:exponential damage law; 3:logarithmic damage law)		
Elasto-plastisches Versagens Mo- del für tonige Gesteine	Linear Orthotropic elastic model parameters for the soil matrix. (1; MC; 2:HB, 3:Camclay)		
	Coupling behaviour. ITYCL = 0: bond behaviour is not activated		
	MC or HB or BBM for the clay matrix - shape in p-q diagram		
	MC or HB or BBM for the clay matrix - shape in deviatoric plane		
	MC or HB or BBM potential for the clay matrix - shape in p-q diagram		
	MC or HB or BBM plastic potential for the clay matrix - shape in the deviatoric plane		
	MC or HB or BBM Hardening law for clay matrix, used only if bond behaviour is not activated		
	Rate dependency parameters		
	Control parameters for SPA (Backward euler scheme)		

Für weitere Informationen wird auf die Projekt-Webseite verwiesen:

https://deca.upc.edu/en/projects/code_bright

A.4 ABAQUS

ABAQUS ist ein kommerzielles Finite-Elemente-Programmsystem, mit dem Fragestellungen aus den Bereichen Strukturmechanik, Wärmeleitung, Akustik, Kontakt- und Kopplungstechnik sowie Bodenmechanik behandelt werden können. Das FE-Paket ABAQUS ist besonders geeignet für Anwendungen mit großen Geometrien und physikalischen Nichtlinearitäten, wie z. B. bei Umformprozessen. Die starke Verbreitung von ABAQUS ist vor allem in der Vielseitigkeit und Unabhängigkeit der Element- und Materialbibliothek, der großen Fähigkeit bei nichtlinearen Analyseformen und der Vielfältigkeit bei der Modellierung von Kontaktproblemen sowie der Integrationsmöglichkeit von Benutzerroutinen begründet /ABA 14/.

Mit ABAQUS können eine Vielzahl thermischer, akustischer und strukturmechanischer Problemstellungen behandelt werden. Im Folgenden sind einige mechanische Beispiele zusammengestellt /ABA 14/:

- statische und dynamische Spannungs-/Dehnungsanalysen geometrisch linearer und nichtlinearer Materialen,
- Bruchmechanik,
- Fehlermessungen und Rissausbreitungsanalyse.

Folgende Stoffmodelle sind in ABAQUS implementiert /ABA 14/:

- linear und nichlineare elastische Materialien,
- isotrope und anisotrope Materialien,
- elasto-plastische Materialien (Fließkriterien von Drucker-Prager, von Mises, Roscoe, Mohr-Coulomb, Ramberg-Osgood, ORNL-Theorie, isotrope und kinematische Verfestigung), Kriechen,
- viskoelastische Materialien Beton-Modell,
- temperaturabhängige Materialien Gesetze f
 ür W
 ärmeleitung, W
 ärmekonvektion und Strahlung,
- poröses Medium (Boden, Fels, usw.) Clay-Plastizitätsmodell,

 Plastizitätsmodell mit poröser oder lin. Elastizität, zudem Benutzerschnittstelle für eigene Materialdefinitionen.

A.5 PLAXIS

PLAXIS 3D ist ein kommerzielles finite Element Programm mit einem 3D Pre- und Postprozessor, welches den Import von CAD Modellen und dessen Weiterverarbeitung erlaubt. Die Einsatzgebiete liegen häufig in der Geotechnik und der Felsmechanik. Das Programm-Paket beinhaltet Modelle zur statisch elasto-plastischen Verformung, fortgeschrittene Bodenmodelle, Stabilitätsanalyse, Konsolidierung und Sicherheitsanalyse /BRI 16/. Das Programm ist kommerziell und von den Anschaffungskosten vergleichbar mit FLAC3D.

Im Folgenden sind die in PLAXIS 3D implementierten Stoffgesetze aufgeführt /PLA 16/:

- Linear elastisches Model
- Mohr-Coulomb Model (MC)

Das Mohr Coulomb-Modell kann verwendet werden, um realistische Tragfähigkeiten und Lasten von Fundamenten zu berechnen, sowie andere Anwendungen, bei denen das Bruchverhalten von Böden untersucht werden soll.

• Hardening Soil Model (HS)

Dieses Modell ermöglicht die Berücksichtigung der Ver-/Entfestigung eines Materials aufgrund der plastischen Kompaktion (cap hardening) sowie plastische Scherung durch eine deviatorische Belastung (shear hardening). Um die Erhöhung der Steifigkeit von Materialien bei kleinen Deformationen zu berücksichtigen, steht das Hardening Soil Model mit geringer Steifigkeit zur Verfügung.

- Hardening Soil Model mit geringer Steifigkeit
- Soft Soil Model (SS)
- Soft Soil Creep Model (SSC)
- Jointed Rock Model (JR)
- Modified Cam Clay Model (MCC)

- NGI-ADP Model (NGI-ADP)
- Sekiguchi-Ohta Model (Sekiguchi-Ohta)
- Hoek-Brown Model (HB)

Das Hoek-Brown Model kann verwendet werden, um das Deformationsverhalten von Felsformationen zu beschreiben. Es basiert auf dem Hoek-Brown Bruchkriterium. Alternativ kann das Jointed Rock Model für geschichtetes und geklüftetes Gestein verwendet werden.

In PLAXIS ist es zudem möglich eigens in Python programmierte Stoffmodelle in den Berechnungen zu verwenden.

A.6 ANSYS

ANSYS ist eine kommerzielle Finite-Elemente-Software, mit der Fragestellungen in der Strömungsmechanik, Strukturmechanik, Elektromagnetik, Multiphysik und Systemsimulation, sowie Temperaturfelder behandelt werden können. Zur Simulation von mechanischen Verformungen, steht die Software ANSYS-Mechanical zur Verfügung. Mit ANSYS-Mechanical können strukturelle lineare/nichtlineare und dynamische Analysen durchgeführt werden. Das Produkt bietet ein komplettes Set an Elementverhalten, Materialmodellen und Gleichungslösern für eine Vielzahl von Konstruktionsproblemen. Darüber hinaus bietet ANSYS-Mechanical die Möglichkeit der thermischen Analyse und der gekoppelten Physik, einschließlich akustischer, piezoelektrischer, thermischstruktureller und thermoelektrischer Analysen (siehe für weitere Informationen /ANS 19/).

Im Untertagelabor in Bure wurden Erhitzerversuche zur Erforschung thermischhydraulisch-mechanischer Wechselwirkungen durchgeführt. In diesen Versuchen wurden die zeitlichen Veränderungen der Temperatur-, Porenwasserdruck- und Spannungsfelder infolge des Eintrags von Wärmeenergie gemessen /SCH 12b/.

Die DBE TECHNOLOGIE GmbH entwickelte in Zusammenarbeit mit der DYNARDO GmbH Simulationsmodelle mit denen diese thermisch-hydraulisch-mechanisch (T-H-M) Prozesse im Tonstein modelliert werden können. Der in situ Erhitzerversuch wurde mittels gekoppelter, 3-dimensionaler Finite-Element Analyse (mit ANSYS-Mechanical und multiPlas) numerisch simuliert. Dabei wurden spezielle Routinen zur Poroelastizitätstheorie, thermisch-hydraulischen Kopplung und hydraulisch-mechanischen Kopplung in isotropen oder anisotropen Tonsteinformationen entwickelt und in ANSYS implementiert /SCH 12b/.

Für die Simulationen wurden nichtlineare Wechselwirkungen zwischen anisotropen thermischen, mechanischen und hydraulischen Materialeigenschaften durch folgende Kopplungsbeziehungen berücksichtigt /SCH 12b/:

- T-H Kopplung: die Aktualisierung der Porenwasserdrücke infolge von Temperaturänderungen sowie die Temperaturabhängigkeit der hydraulischen Leitfähigkeit,
- T-M Kopplung: die Beeinflussung des mechanischen Spannungs- und Verformungszustands durch thermische Dehnungen,
- H-M Kopplung: die Aktualisierung der effektiven Spannungen infolge von Porenwasserdruckänderungen und
- M-H Kopplung: die Abhängigkeit der hydraulischen Leitfähigkeit vom Spannungszustand und vom Vektor der plastischen Dehnungen sowie die Aktualisierung der Porenwasserdrücke infolge von Spannungsänderungen.

A.7 OpenGeosys

OpenGeoSys (OGS) ist eine wissenschaftliche Open-Source-Initiative zur numerischen Simulation thermo-hydromechanisch-chemischer (THMC) Prozesse in porösen Medien. OpenGeoSys verwendet die Finite-Elemente-Methode (FEM)) zur Lösung von Problemstellungen in porösen und geklüfteten Medien. Zu diesem Zweck basiert OGS auf einem objektorientierten FEM-Konzept mit einem breiten Spektrum an Schnittstellen für die Vor- und Nachbearbeitung. Die OGS-Idee ist seit Mitte der achtziger Jahre in Entwicklung.

Die Idee von OGS ist es, der Community eine offene Plattform zur Verfügung zu stellen, die mit professionellen Software-Engineering-Tools, wie plattformunabhängiger Kompilierung und automatisiertem Benchmarking, ausgestattet ist. Die Objektorientierung (OO) in OGS bietet einen geeigneten Rahmen für die Entwicklung von Codes. Die Parallelisierung von OO-Codes ist jedoch noch nicht effizient. Die HPC-Effizienz von OO-Codes wird zukünftigen Forschungsarbeiten weiterentwickelt /KOL 12/.

A.8 Code_Aster/salome_meca

Code_Aster ist eine Sammlung von Lösern um mit der Finite-Elemente Methode thermo-mechanische Untersuchungen von Strukturen/Körpern durchzuführen. Salome ist ein Werkzeug für das Pre- und Postprocessing solcher Analysen. Die Zusammenführung beider Werkzeuge ist salome_meca, welches letztlich ein Werkzeug zum sog. Computer Aided Engineering (CAE) bildet. Entwickelt wurden die Codes von EDF (Électricité de France) und waren ursprünglich nicht für geowissenschaftliche Fragestellungen konzipiert. Durch die quelloffene Struktur des Codes und eine anwachsende Nutzergemeinde im französisch-sprachigen Raum wurden jedoch zunehmend auch geowissenschaftliche Fragestellungen untersucht und auch Stoffgesetze, die rein für die Geowissenschaften nutzbar sind implementiert. EDF führt ein rigoroses Qualitätsund Versionsmanagement durch. Das Programm beinhaltet eine Python-Schnittstelle, so dass ein Modell sowohl in Textform als auch mittels der grafischen Benutzeroberfläche definiert werden kann.

Insgesamt sind in den Code ca. 200 unterschiedliche Stoffgesetze implementiert und ein breites Angebot von Lösern für Probleme jeglicher Art vorhanden, auch von THM-Fragestellungen und den entsprechenden Stoffgesetzen wie beispielsweise dem BBM.

Für weitere Informationen wird auf die Projektseite verwiesen, siehe /EDF 18/.

B Materialkennwerte Tonstein

In diesem Kapitel werden beispielhaft HM-Materialkennwerte für bestimmte Tonsteine aufgeführt. Aufgrund der hohen Variabilität der Parameterkennwerte, aufgrund einer Vielzahl an Labor- und in situ Versuchen an verschiedenen Ton(gesteinen), können hier nur beispielhafte Parameterkennwerte bzw. deren Literaturverweise aufgeführt werden.

Es ist zu beachten, dass für geotechnische Materialien, wie z. B. Bentonit, andere Materialkennwerte gelten. Insbesondere durch die unterschiedlichen Verfüllverfahren (Bentonit-Pellets oder -blöcke) entstehen unterschiedliche Anfangsbedingungen der HM-Eigenschaften.

Die Materialkennwerte wurden überwiegend aus Untersuchungen zum Opalinuston in der Schweiz oder den Tonsteinen der COx-Formation in Bure (Frankreich) entnommen. Gesteinsmechanische Parameter werden im Kapitel 3 aufgeführt.

B.1 Wassergehalt

Nach /AME 07/ werden im Felsenlabor Mont Terri Feuchtegehalte des Opalinustons im Durchschnitt von $6,4 \pm 1$ %, für die Bohrung Benken von $4,5 \pm 0,8$ % und in der Bohrung Schlattingen-1 von $4,3 \pm 0,4$ % gemessen. Nach /GAU 02/ beträgt der Anteil des freien Wassers am Gesamtwassergehalt ca. 26 %.

Die COx-Formation enthält einen Porenwassergehalt von 7 bis 8 %. Die Wässer sind pH-neutral /AND 05b/.

Im Projekt VerSi /LAR 10/ wurde ein synthetischer Tonsteinstandort charakterisiert. Für diesen Standort wurden auf Basis der Daten zum Opalinuston der Schweiz /BFS 07/ ein Gesamt-Wassergehalt von 14,6 Gew.-% angenommen.

B.2 Dichte und Porosität

Nach /MAR 14/, /AME 07/, /GAU 02/ nimmt die Gesteinsdichte von Opalinuston grundsätzlich mit zunehmender Teufe zu. In der Bohrung Benken beträgt die bergfeuchte Dichte bei einer Tiefe von 600 m $2,52 \pm 0,03$ g/cm³ und die Trockendichte 2,43 ± 0,06 g/cm³ (bergfeuchte Gesteinsdichte abzüglich des gemessenen Wassergehalts).

Wie bei der Dichte zeigt sich auch bei der Porosität eine Abnahme mit zunehmender Tiefe. Für die angestrebte Endlagertiefe im Opalinuston sind Porositäten von 8 - 16 % zu erwarten. Die Streuung liegt bei 1 - 3 % /MAR 14/. In /MAß 16/ wird eine Referenzporosität von 11 % mit einer effektiven Porosität von 7 % angegeben. Dies entspricht einer Gesteinsdichte von 2,41 g/cm³.

Nach /AND 05b/ beträgt die Porosität der COx-Tonsteine zwischen 10 – 18 %. Es wird eine totale Porosität von 18 % angegeben.

Es ist zu beachten, dass die für die Diffusion zugängliche effektive Porosität für Anionen und Kationen unterschiedlich ist. Durch Anionenausschluss ist die diffusionsfähige Porosität für Anionen signifikant niedriger als die Gesamtporosität. In /JAH 16/ sind effektive Porositäten sowie weitere Parameterwerte zum Opalinuston zusammengestellt.

B.3 Permeabilität, Durchlässigkeitsbeiwert und Transmissivität

Es ist zu beachten, das hydraulische Durchlässigkeiten als intrinsische Permeabilität und als k_f -Wert (Durchlässigkeitsbeiwert) angegeben werden. Es erfolgte keine Umrechnung.

In /MAß 16/ wird eine Permeabilität des Opalinustons von 6,5·10⁻²¹ m² (senkrecht) und 1,7·10⁻²⁰ m² (parallel) zur Schichtung angegeben.

In /JAH 16/-Tabelle 34 sind Durchlässigkeitsbeiwerte für Opalinuston der Bohrung Benken und dem Untertagelabor Mont Terri für verschiedene Teufen und Faziesausprägungen aufgeführt.

Messungen in tiefen Bohrungen(-490 m), haben gezeigt, dass die Schichtpermeabilität in der COx-Formation im Bereich von 10⁻¹² bis 10⁻¹⁴ m/s variiert, wobei die meisten Messungen zwischen 5·10⁻¹³ und 5·10⁻¹⁴ m/s konzentriert sind /AND 05a/.

B.4 Diffusion

Das Gefüge von Tonsteinen ist in der Regel aufgrund der Sedimentation geschichtet. Diese Struktur führt zu einem anisotropen Materialverhalten, die auch den Diffusionskoeffizienten beeinflusst. Der Diffusionskoeffizient parallel zur Schichtung ist typischerweise höher als senkrecht zur Schichtung. Die Anisotropie des Diffusionskoeffizienten ist unabhängig von der diffundierenden Spezies. Für den Opalinuston am Standort Benken wurde ein Anisotropiefaktor von 2 bis 6 und etwa ein Faktor 2 für den Boom Clay in Mol bestimmt /RÜB 07/. In /RÜB 07/-Tabelle 3.2 sind zudem Diffusionskoeffizienten für Tonsteine aus verschiedenen Untertagelaboren zusammengestellt.

Die Diffusionskoeffizienten sind zudem elementspezifisch (siehe Kap. 2.3.2). In /JAH 16/ sind in der Tabelle 48 Diffusionsparameter für Anionen und Kationen aus Mont Terri und für die Bohrung Benken zusammengestellt. Die Tabelle beinhaltet Werte von Labor- und in situ Tests. In dem Bericht NTB 14-03 der Nagra /NAG 14a/ sind element-spezifische Diffusionskoeffizienten für Opalinuston zusammengestellt. In /MAß 16/ wird für erste überschlägige Rechnungen eine von der transportierten Spezies unabhängige effektive Diffusionskonstante von $D_e = 1 \cdot 10^{-11}$ m²/s angenommen.

Es werden folgende Diffusionskoeffizienten für den COx Tonstein angenommen /AND 05c/:

- 2,5.10⁻¹⁰ m²/s für Kationen bei einer verfügbaren Porosität von 5 % und
- 5.10⁻¹² m²/s f
 ür die anionische Spezies (haupts
 ächlich Jod und Chlor) bei einer verf
 ügbaren Porosit
 ät von 18 %.

B.5 Zweiphasenfluss

In /JAH 16/ sind Ergebnisse aus Laborexperimenten zur Bestimmung der Kapillardruck-Sättigungsbeziehung des Opalinustons der Bohrung Benken nach /GIM 03/ aufgeführt (Abb. B 1). Es wurden die Ad- und Desorptionsthermen von Wasser bestimmt.



Abb. B 1 Kapillardruck-Sättigungsbeziehung (Bohrung Benken und Felslabor Mont Terri). In grauer Farbe ist die Bandbreite der für das schweizerische Wirtsgestein im Zürcher Weinland empfohlenen Kapillardruck-Sättigungsbeziehung auf Basis des Van-Genuchten Parametermodells hervorgehoben /JAH 16/

Der Verlauf der Ad- und Desorptionsdaten lässt sich mit dem Modell nach Van-Genuchten beschreiben. Die ermittelten Van Genuchten Parameterwerte sind in der Tab. B 1 zusammengestellt. Für den Opalinuston ergibt sich anhand der Porenverteilung ein äquivalenter Porenradius von 25 nm und daraus ein Gaseindringdruck von ca. 6 MPa /JAH 16/.

 Tab. B 1
 Zweiphasenflussparameter f
 ür den Opalinuston aus nordschweizerischen Lokalit
 üten /JAH 16/, /GAU 02/
 GAU 02/
 GAU

	Benken Desorption	Benken Adsorption	Mont Terri	Empfehlungen Nagra 2002	Annah- men in /MAß 16/
Scheinbarer Gasein- dringdruck α^{-1} [MPa]	15	7	21	$5 \le \alpha^{-1} \le 21$	20
Formfaktor n [-]	1,6	1,5	1,7	1,5 ≤ n ≤ 2,0	1,7
Residuale Porenwas- sersättigung <i>S_{wr}</i> [-]	-	-	-	$0 \leq S_{wr} \leq 0,5$	0
Residuale Gassätti- gung <i>S_{gr}</i> [-]	-	-	-	$0 \leq S_{gr} \leq 0,05$	0

In der COx-Tonsteinformation beträgt der Anteil an gebundenen Wasser etwa 50 % des in der gesamten Porosität enthaltenen Wassers /AND 05b/. Es wurden Experimente zur Messung des Gaseindringdruckes im COx-Tonstein durchgeführt. In Auflockerungszonen wurden Werte von 2 bis 3 MPa und in unbeschädigtem Tonstein von 4 bis 5 MPa gemessen /AND 05a/.

B.6 Sorption

In /JAH 16/ sind in der Tabelle 49 in situ ermittelte Verteilungskoeffizienten (k_d -Werte) von Opalinuston aus Benken und Mont Terri zusammengestellt. Die Tabelle umfasst k_d -Werte für die einzelnen Radionuklide und für unterschiedliche pH-Werte.

In dem Bericht NTB 14-03 der Nargra /NAG 14a/ sind in der Tabelle A3.5-4a /NAG 14a/ k_d-Werte für Opalinuston zusammengestellt. Die Spalten enthalten die unterschiedlichen Annahmen für die verschiedenen ENSI-Rechenfälle (Abhängigkeit vom Partialdruck und der Salinität). Zudem sind in /NAG 14a/-Tabelle A3.4-7, k_d-Werte für Bentonit zusammengestellt. Es werden auch hier für die verschiedenen ENSI-Rechenfälle unterschiedliche k_d-Werte in Abhängigkeit vom Partialdruck und der Salinität angegeben.

B.7 Eigenschaften der Lösung

Der COx ist ein natürlich reduzierendes Medium. Diese Eigenschaft ist besonders günstig bei der Begrenzung der Korrosion von metallischen Werkstoffen und der Freisetzung von Radionukliden /AND 05a/. Die Formation zeigt einen neutralen pH-Wert und ist reduzierend, dies wird durch die Anwesenheit von Pyrit und organischer Substanz bestätigt /AND 05a/.

Dichte

Nach /MÄD 09/ können die Salzgehalte im Opalinuston zwischen 7 und 22 g/l liegen. In /MAß 16/ wird ein mittlerer Wert von 15 g/l angenommen. Bei 40 °C und einem hydrostatischen Druck von ca. 7 MPa, liegt laut /JAH 16/ eine Dichte von 1004,4 kg/m³ auf Endlagerniveau im Opalinuston vor.

Die Lösungsgehalte der Porenwässer im COx betragen 3 bis 4 g/l, etwa 4 g/l im Dogger und 0,9 g/l im kalkhaltigen Oxfordian. Der höhere Salzgehalt des Wassers im COx deutet auf die Abwesenheit von hydraulischem Austausch mit wasserführenden Formationen hin. Es bestätigt die geringe Permeabilität der Tone und die sehr langsame Verschiebung von Ionen in Lösung /AND 05c/.

Viskosität

Die Viskosität μ_w der Lösung ist abhängig von der Temperatur *T*, der Dichte bzw. dem Salzgehalt *C* und dem Druck. Nach /MAß 16/ errechnet sich die Viskosität aus folgender Beziehung (der Druck wird vernachlässigt):

$$\mu_w = (1 + 2,765 \cdot 10^{-3}C) \cdot \exp(11,897 - 5,943 \cdot 10^{-2}T + 6,422 \cdot 10^{-5}T^2) \cdot 1e^{-3}$$
(5.1)

B.8 Gesteinsmechanische Parameter

Ein Material- oder Stoffmodell (siehe Kap. 3) beschreibt die physikalischen Eigenschaften eines Materials und soll vorhersagen, wie und in welchem Maß das Material auf äußere Einflüsse (wie z. B. Druck oder Temperatur) reagiert. Je nach Komplexität bzw. berücksichtigter Prozesse werden für die unterschiedlichen Stoffmodelle eine Vielzahl an Parametern benötigt. In /MAR 14/-Tabelle 3.6-1 sind Parameterwerte für zwei verschiedene Datensätze zusammengefasst welche für geomechanische Modellierungen verwendet wurden. Im Folgenden werden beispielhaft Parameterwerte für geomechanische Modellierungen angegeben.

Elastizität und Querkontraktionszahl

Für eine Betrachtung des Opalinustons als isotrop-elastisches Gestein können die in /JAH 16/-Tabelle 50 und 51 zusammengefassten Werte herangezogen werden. Für das E-Modul des Opalinustons zeigt sich eine Anisotropie des mechanischen Verhaltens. Werte parallel zur "Schichtung" sind etwa doppelt so hoch wie Werte senkrecht zur Schichtung /MAR 14/.

Nach /GAU 02/ wird für die Querkontraktionszahl des Opalinustons ein Wert von v = 0,27 für alle Belastungsrichtungen (ohne Anisotropie) angenommen.

- Elastizitätsmodul E = 10 GPa (parallel zur Schichtungsebene)
- Elastizitätsmodul E = 4 GPa (senkrecht zur Schichtungsebene)
- Querdehnungszahl v = 0.35 (parallel zur Schichtungsebene)
- Querdehnungszahl v = 0.25 (senkrecht zur Schichtungsebene)

Das Elastizitätsmodul ist abhängig von der Feuchte, der Verformungsgeschwindigkeit und anderen Umgebungsbedingungen. Eine Temperaturabhängigkeit ist nicht beobachtbar solange die Materialeigenschaften nicht geändert werden /JAH 16/.

Festigkeit

Die Festigkeit eines Materials entspricht dem maximalen Widerstand gegen mechanische Belastungen, bevor es zu einem Versagen kommt und wird angegeben als mechanische Spannung. Ein Versagen ist als Bruch oder plastische Verformung definiert.

Tonsteine welche irreversibel verformt werden, können ein duktiles und sprödes Verhalten zeigen. Nach /MAR 14/ treten beim duktilen Verhalten nach dem Überschreiten der Fließgrenze plastische Deformationen auf, bis irgendwann die Bruchgrenze erreicht wird (Dilatanz). Beim spröden Materialverhalten treten vor dem Bruch keine signifikanten Abweichungen vom elastischen Verhalten auf, nach Überschreitung der Festigkeit bilden sich diskrete Bruchflächen oder Scherbänder. Überkonsolidierte Gesteine wie der Opalinuston neigen je nach Belastungszustand eher zum Sprödbruchverhalten. Laborversuche haben gezeigt, dass bei einer Abnahme der Flüssigkeitssättigung die Zugfestigkeit steigt /MAR 14/.

In /JAH 16/ werden für Modellrechnungen des Referenzprofils Süd für den Opalinuston folgende Werte angenommen:

- Zugfestigkeiten von 2,7 ± 0,8 MPa (parallel zur Schichtung
- Zugfestigkeiten von 1,2 ± 0,3 MPa (senkrecht zur Schichtung)

In /MAß 16/ werden weitere Werte zur Beschreibung des Opalinustons basierend auf /JAH 16/ angegeben.

- Die Kohäsion beträgt 3,5 MPa
- Winkel der inneren Reibung ist 23°

Zudem sind in /JAH 16/-Tabelle 56 ermittelte Zugfestigkeiten und in der /JAH 16/-Tabelle 57 und 58 Druckfestigkeiten für Opalinuston Proben aus Benken und Mont Terri zusammengestellt. Die Druckfestigkeit zeigt bei Tonen oder Tonsteinen eine Abhängigkeit vom Konsolidierungsgrad und dem Wassergehalt. Mit zunehmender Feuchte nimmt die Festigkeit signifikant ab. Die Zugfestigkeit ist in der Regel ca. ein Zehntel kleiner als die Druckfestigkeit. Bei Minifrac-Untersuchungen zur Ermittlung der hydraulischen Zugfestigkeit wurde für unterschiedliche Manteldrücke eine hydraulische Zugfestigkeit von 10 MPa abgeleitet.

Wenn als Bruchkriterium das Mohr-Coulomb-Kriterium angewendet werden soll, können entsprechende Festigkeitsparameter (wie z. B. Kohäsion und innerer Reibungswinkel), welche das Kriterium beschreiben, aus /JAH 16/ Tabelle 64 und 65 entnommen werden. Weitere Parameterwerte finden sich in /MAR 14/-Tabelle 3.3-2.

Die mineralogische Zusammensetzung und die Dichte der COx-Tone induzieren ebenfalls eine relativ hohe Festigkeit. Ihr Widerstand gegen Druck ist größer als 25 MPa in Carbonat haltigen Niveaus und ca. 20 MPa in der Mitte der COx-Formation /AND 05a/. Die vertikale Belastung ist gleich dem Gewicht der überlagernden Schichten und beträgt 12 MPa im Untertagelabor bei Bure.

Die Bewetterung des Endlagerbergwerkes kann den Tonen Wasser entziehen. Die Entsättigung verfestigt den Tonstein, somit steigt seine mechanische Festigkeit. Die Erhöhung der uniaxialen Druckfestigkeit beträgt etwa 0,45 MPa pro Feuchtigkeitsgrad. Wenn der Ton signifikant entsättigt wird, können sich auch diffuse Mikro-Spalten bilden /AND 05a/. Nach /AND 05a/ wird der Druck, welcher das Dilatanzkriterium der COx-Tonsteine verletzen würde mit 12 MPa angegeben. Die Abb. B 2 zeigt die Abhängigkeit der einaxialen Druckfestigkeit Verschiedener Tone/Tonsteine vom Wassergehalt.



Abb. B 2 Vergleich der einaxialen Druckfestigkeiten verschiedener Tonsteine in Abhängigkeit des Wassergehalts /MAR 14/

Biot-Koeffizient und Biot-Modul

Der Biot-Koeffizient ist ein experimenteller Parameter, die die Vernetzung der Poren untereinander beschreibt. Der Biot-Koeffizient beschreibt die Effektivität der Druckübertragung des Porenfluiddruckes auf das Korngerüst. Der Biot-Modul ist der Kehrwert des hydraulischen Speicherkoeffizienten. Für den Biot-Koeffizienten wird ein Referenzwert von 0,6 (Mont Terri) und für den Biot-Modul von 6,7 GPa (Zürcher Weinland) für den Opalinuston ausgewiesen /JAH 16/. In der Tabelle 71 in /JAH 16/ sind weitere Biot-Koeffizienten für Opalinuston aus verschiedenen Lokationen zusammengestellt.

Visko-elastische Parameter (Kriechen)

Der Porenwasserdruck spielt eine wichtige Rolle für das Kriechverhalten des Opalinustones. Daneben wird die Kriechrate des Opalinustons auch von weiteren Faktoren wie der Deviatorspannung und dem Manteldruck beeinflusst /JAH 16/. In der Tab. B 2 sind Visko-elastische Kriechraten beispielhaft für Opalinuston angegeben

Parameter	Druckspannung [MPa]	Kriechrate [1/s]	Literatur
Opalinuston Mont Terri	0,7	9,4 ·1 0 ⁻¹¹	/ZHA 04/
	5	2,6·10 ⁻¹¹	/ZHA 04/

Tab. B 2 Visko-elastische Kriechraten /JAH 16/

Nach /AND 05a/ verformen sich Tone allmählich zu einem isotropenen Spannungszustand wenn eine deviatorische Spannung (d. h. nicht-isotrope Spannung) auf den Tonstein wirkt. Dieser verzögerte Verformungsmechanismus (Kriechen) ist langsam. Eine Kriechrate von 10⁻³ bis 10⁻⁴ pro Jahr wurde an wassergesättigten Proben nach zwei bis drei Jahren unter konstanter deviatorischer Spannung von 5 bis 15 MPa gemessen. Das Kriechverhalten der Tone wird zu einem allmählichen Druckaufbau der unterirdischen Strukturen führen /AND 05a/. Die nach 3 Jahren gemessene Kriechgeschwindigkeit entspricht bestenfalls Verschiebungen von wenigen Millimetern pro Jahr. Im Vergleich dazu ist die gemessene Kriechgeschwindigkeit 1.000-mal niedriger als die im Boom-Clay im Untertagelabor in Mol (Belgien) /AND 05a/. Messungen in einem Hohlraum im Meuse/Haute-Marne Untertagelabor, zeigen eine Verformungsamplitude von wenigen Zentimetern nach sechs Monaten an. Dies entspricht den Verformungsraten, die in den Kurzzeitversuchen (über 100 Tage) gemessen wurden /AND 05a/.

Nach zwei bis drei Jahren sollte sich die Verformungsrate um mindestens einen Faktor von 10 verringern haben. Dies konnte ebenfalls in Straßentunneln beobachtet werden, welche vor einigen Jahrzehnten in ähnlichen Formationen gebaut wurden /AND 05a/. Mit der Zeit verringert sich die Kompaktionsrate weiter. Nach 100 Jahren sollte sie 100 mal niedriger und nach 1.000 Jahren um das 1000 fache sinken /AND 05a/.

Quelldruck

Ungesättigte Tonsteine können durch Wasseraufnahme quellen. Das Ausmaß der Volumenzunahme hängt von den geochemischen Eigenschaften der zutretenden Lösung und der Materialeigenschaften des Tones selber ab. Der Quellvorgang kann die Eigenschaften des Tonsteines, wie z. B. die Porosität und damit auch die hydraulische Durchlässigkeit verändern. Aufgrund der Anisotropie der Tonsteine ist auch der Quellvorgang in der Regel anisotrop.

In /JAH 16/ sind in der Tabelle 67 Literaturwerte für ermittelte Quelldrücke des Opalinustons in der Schweiz (Benken, Mont Terri und verschiedene Bauprojekte) aufgeführt. Es werden zudem Werte senkrecht und parallel zur Schichtung aufgeführt. Die an Proben der Bohrung Benken bestimmten Quelldrücke sind vergleichbar zu denen in Mont Terri und Werten aus der Literatur. Von /JAH 16/ werden basierend auf den Angaben in der Tabelle 67 folgende Werte abgeschätzt:

- Quelldruck 0,8 MPa 1,4 MPa (senkrecht zur Schichtung)
- Quelldruck 0,1 MPa 0,6 MPa (parallel zur Schichtung)

Sonstige Parameter

Aus der Bohrung Schlattingen-1 (Opalinuston) wurden Proben entnommen und im Labor untersucht. Aus Verformungskurven wurde eine Vorbelastung bzw. maximaler Überlagerungsdruck entsprechend der Bandbreite an Messwerten von $20 \le \sigma'_p \le 24$ MPa abgeleitet. Somit errechnet sich aus dem rezenten Druck in der Entnahmetiefe ein Überkonsolidierungsverhältnis OCR zwischen 1,5 und 1,9.

C Glossar

Spannungszustand: Als Spannungszustand im Gebirge wird die Gesamtheit aller Spannungskomponenten bezogen auf einen Punkt im Gebirge bezeichnet /NIE 17/.

Primärer Spannungszustand: Der primäre Spannungszustand ist der im Gebirge herrschende durch nicht anthropogene Einwirkungen beeinflusste Spannungszustand /NIE 17/.

Sekundärer Spannungszustand: Der sekundäre Spannungszustand im Gebirge ist der nach einem künstlichen Eingriff im Gebirge herrschende Spannungszustand /NIE 17/.

Effektive Spannung: Die effektive Spannung (effective stress) ist die gesamte Spannung abzüglich dem Porenwasserdruck (Korn zu Korn Spannung) /NIE 17/.

Deviatorische Spannung: Die deviatorische Spannung (deviatoric stress) ist die Abweichung des Spannungstensors in einem allgemeinen Koordinatensystem von der mittleren Spannung. Der Spannungsdeviator (principal deviatoric stress) der Hauptspannungen beinhaltet die Beträge, um wieviel jede Hauptspannung von der Mittelspannung abweicht. Sie bestimmen die effektive Scherspannung, welche die Intensität des deviatorischen Anteils angibt /BUR 18/.

Festigkeit: Die Festigkeit ist ein Maß dafür, wie hoch die ertragbare Beanspruchung eines Materials ist bevor es bricht (z. B. die Bruchfestigkeit oder die Zugfestigkeit).

Steifigkeit: Die Steifigkeit wird meistens als eine Proportionalitätskonstante zwischen den Inkrementen bzw. Raten von Spannung und Dehnung betrachtet. Man spricht von einem Elastizitätsmodul, Steifemodul, Schubmodul, Kompressionsmodul usw. /HER 05/.

Dilatanz: Dilatanz ist eine Auflockerung des Korngerüsts infolge Scherung und mit einer Volumenzunahme verbunden. Die Volumenzunahme erfolgt durch die Scherung induzierte Veränderung der Partikelanordnung (Abb. C 1).



Abb. C 1 Dilatanz im Scherversuch an einer Kugelpackung aus /BEN 17/

Kritischer Zustand: Grob gesehen wird ein lockerer Boden bei einer langen monotonen isobaren Scherung verdichtet und ein dichter Boden aufgelockert. Kritischer Zustand ist ein asymptotisch angestrebter Attraktor, hier für isochores (mit e = const) und für isobares (mit p = const) Scheren. Als Attraktor verstehen wir hier die vom Sand angestrebte Dichte-Druck-Kombination. Beim isochoren Scheren (mit e = const) probiert der Sand durch Druckänderung p und beim isobaren Scheren (mit p = const) durch Porenzahländerung e, sich dem Attraktor zu nähern. SS bezeichnet den kritischen Zustand (steady state) und QSS den quasi kritischen Zustand (quasi steady state) /NIE 17/.

Reibungswinkel: Im Grenzzustand des Gleichgewichts zweier Flächen, ist der Tangens des Reibungswinkels das Verhältnis von Reibungskraft zu Normalkraft. Er gibt die Neigung der resultierenden Kraft in der Reibungsfläche an (Abb. C 2).



Abb. C 2 Reibungswinkel im Bezug zur Normal- und Scherbeanspruchung /SMI 14/

Dilatanzwinkel: Der Materialkennwert für die Dilatanz ist der Dilatanzwinkel (Dilatationswinkel), der die mit der Scherverformung einhergehende Auflockerung und Volumenvergrößerung des Materials beschreibt. Er ist definiert als das Verhältnis von Volumendehnung zur Scherdehnung und wird in Grad angegeben. Der Dilatanzwinkel steigt mit zunehmendem Reibungswinkel und wird auch von der Kornform beeinflusst /WIK 18/.

(nicht)-assoziierte Fließregel: Nach /SCH 11/: Im assoziierten Fall besitzt die Fläche des plastischen Potentials g, auf der die Verzerrungsinkremente normal steht, die gleiche Gestalt und Größe wie die Fließfläche f (Abb. C 3).



Abb. C 3 Schematische Darstellung der Fließregel

Die Richtung und Größe des plastischen Verzerrungsinkrements $d\varepsilon_{ij}^{p}$ ist bei assoziiertem Fließen durch die Normalitätsbedingung $\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}}$ und den plastischen Multiplikator $\delta \lambda$ im Punkt σ_{ij} vorgegeben.

$$d\varepsilon_{ij}^p = \delta \lambda \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \tag{5.2}$$

Bei der assoziierten Fließregel wird der Fließregel ein bestimmtes Versagenskriterium zugeordnet (plastische Potential = Bruchkriterium), bei nicht assoziiertem Fließen entspricht ∂f der Skalarfunktion g bzw. dem plastischen Potential.

Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH

Schwertnergasse 1 50667 Köln Telefon +49 221 2068-0 Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14 **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