

---

---

**Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik  
Technische Universität Clausthal**

---

**Vorprojekt – Internationales Benchmarking zur  
Verifizierung und Validierung von TH<sup>2</sup>M-Simulatoren  
insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse  
in Endlagersystemen (BenVaSim)**

**(Vorprojekt Benchmarking TH<sup>2</sup>M-Simulatoren)**



**Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben**

**mit dem Förderkennzeichen 02E11506**

**Zeitraum: 01.07.2016 - 30.04.2017**



# Abschlussbericht

zum BMWi-Forschungsvorhaben

## Vorprojekt – Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH<sup>2</sup>M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim)

Förderkennzeichen: 02E11506

Zeitraum: 01.07.2016 - 30.04.2017

**Projektleiter:** Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. K.-H. Lux

**Sachbearbeiter:** Dipl.-Math. M. Rutenberg

**Clausthal-Zellerfeld, im März 2018**

---

**Dipl.-Math. M. Rutenberg**

---

**Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. K.-H. Lux**



Gefördert durch:



Bundesministerium  
für Wirtschaft  
und Energie

aufgrund eines Beschlusses  
des Deutschen Bundestages

BETREUT VOM



**PTKA**  
**Projektträger Karlsruhe**  
Karlsruher Institut für Technologie

**Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Förderkennzeichen 02E11506, Laufzeit 01.07.2016 bis 30.04.2017, gefördert.**

**Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt bei den Autoren.**



## Zusammenfassung der Forschungsergebnisse

Zur Verifikation des im vorangegangenen Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E11041 vom Bearbeiter dieses Vorprojekts (TUC) entwickelten FTK-Simulators für thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulationen unter Berücksichtigung von Zweiphasenflussprozessen sind bis dato erste rudimentäre Arbeiten erfolgt. Unter Verifikation ist dabei die erste Stufe einer Qualitätssicherung mit Fokussierung zunächst auf die Überprüfung der zahlenmäßigen Richtigkeit der Simulationsergebnisse zu verstehen. Zur Verifikation sind bislang vornehmlich analytische Lösungen zu den den simulierten Prozessen zugrunde liegenden Differenzialgleichungen sowie Vergleichsberechnungen mit dem Simulator FLAC<sup>3D</sup> und dem TOUGH-FLAC-Simulator des kalifornischen Lawrence Berkeley National Laboratory herangezogen worden. Da einerseits analytische Lösungen zu den Differenzialgleichungen auch bereits bei isothermen Prozessen und dort insbesondere bei Einbeziehung der Zweiphasenströmung (H<sup>2</sup>M) nur unter sehr starken Vereinfachungen hergeleitet werden können und somit nur sehr bedingt Grundlagen für Verifikationen zur Verfügung stehen, andererseits andere Organisationen mit vergleichbaren Simulatoren vor der gleichen Aufgabe stehen, ist von der TUC ein internationales Kooperationsprojekt zur Durchführung von systematischen Vergleichsberechnungen zu TH<sup>2</sup>M-Prozessen initiiert worden. Sechs Arbeitsgruppen beabsichtigen, sich an diesem Projekt zu beteiligen und Berechnungen zu unterschiedlichen Modellbeispielen in ansteigender Komplexität zur Verifizierung der jeweils eingesetzten und zum Teil auch selbst implementierten und/oder weiterentwickelten Simulatoren durchzuführen („Simulatoren-Benchmarking“). Die Berechnungsergebnisse sollen auf internen Fachtreffen zunächst einander gegenübergestellt und vergleichend diskutiert und dann auch auf öffentlichen Fachtagungen präsentiert werden. Es ist zu erwarten, dass durch das Benchmarking-Vorhaben sowohl die Leistungsfähigkeit und Vertrauenswürdigkeit der einzelnen Simulatoren verbessert wie auch die Sensitivität und fachliche Qualifikation der jeweiligen Bearbeiter für die Bearbeitung derart komplexer Aufgabenstellungen mit zweiseitig gekoppelten Prozesssimulationen und daraus resultierenden vielfältigen sicherheitsrelevanten Wechselwirkungen in der Entwicklung des Endlagerhafelfeldes mit dem einschlusswirksamen Gebirgsbereich gesteigert werden kann.

In dem hier von Juli 2016 bis April 2017 bearbeiteten Vorprojekt zu dem unter dem Kennzeichen 02E11567A seit Mai 2017 als Verbundprojekt mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH (GRS) geförderten Forschungsvorhaben „BenVaSim“ sind von der



TUC vorbereitende Arbeiten zu diesem Forschungsvorhaben unter mehreren Aspekten durchgeführt worden. Ein erster Aspekt der vorbereitenden Arbeiten betrifft Rechercharbeiten zum internationalen Kenntnisstand hinsichtlich Benchmarkings und speziell hinsichtlich Simulatoren-Benchmarkings. Bei der Mehrzahl der Benchmarking-Projekte, die in der Vergangenheit von internationalen Forschungseinrichtungen und Organisationen mit Bezug auf die Endlagerung radioaktiver Abfälle durchgeführt worden sind, hat als primäres Ziel die Validierung von eigenen Herangehensweisen an die Modellierung der betrachteten Endlagerteilsysteme anhand von Messwertkurven aus Feld- oder laborativen Untersuchungen im Vordergrund gestanden. Unter Validierung als einer zweiten Stufe der Qualitätssicherung ist dabei der Beleg der grundsätzlichen physikalischen Eignung der eingesetzten Simulationssoftware zur Abbildung der relevanten Prozesse zu verstehen. Dabei ist allerdings zu berücksichtigen, dass im Rahmen der Validierung gerade bei komplexen gekoppelten Prozessen aufgrund ihrer Wechselwirkungen nicht immer der einzelne Prozess eindeutig identifizierbar ist und die Validierung bei strenger Betrachtung damit die Gesamtheit der Prozesse mit der Beschränkung auf das Beobachtungsumfeld betrifft, nicht aber die einzelnen individuellen Prozesse und ihre Prognosezuverlässigkeit bei der Übertragung auf andere Rahmenbedingungen. Neben diesen auf Labor- und Felduntersuchungen beruhenden Validierungen sind auch organisationsübergreifende Simulatoren-Benchmarkings durchgeführt worden, bei denen die Rahmenbedingungen für die Berechnungsmodelle inklusive der involvierten Differenzialgleichungen vorgegeben worden sind und damit primär die numerischen Lösungsverfahren die zahlenmäßigen Resultate und die Differenzen zwischen ihnen bestimmt haben. Für H<sup>2</sup>M-Simulationen sind der TUC allerdings derartige Simulatoren-Benchmarkings nicht bekannt.

Als zweiter Aspekt der Vorbereitung auf das Benchmarking im BenVaSim-Projekt sind von den Partnerorganisationen die Simulatoren, die von ihrer Seite aus im Projekt eingesetzt werden sollen, im Rahmen von bilateralen Fachgesprächen mit der TUC vorgestellt worden. Dabei hat sich gezeigt, dass die Grundgleichungen für die thermischen, hydraulischen und mechanischen Prozesse in den Simulatoren weitestgehend identisch implementiert sind und auch mechanische Stoffmodelle in ausreichendem Maß für die Zusammenstellung von hinreichend diversen Berechnungsvariationen vorhanden sind. Erste Vorschläge für Berechnungsvariationen konnten daher auch bereits von der TUC ausgearbeitet werden.

Am FTK-Simulator sind als dritter Aspekt im Rahmen der Vorbereitung des Benchmarking-Vorhabens Erweiterungen zur Steigerung seiner Effizienz vorgenommen worden. Dazu ist eine



Einarbeitung in den im Vergleich zu TOUGH2 sehr stark veränderten Quellcode von TOUGH2-MP erfolgt. Die bislang an der TUC erfolgten Adaptionen am Simulator TOUGH2 konnten im Ergebnis auf den parallelisierten Simulator TOUGH2-MP übertragen werden. Erste Testläufe mit dem auf diese Weise erhaltenen Simulator FTK 3.00 konnten im Hinblick auf den Funktionalitätserhalt gegenüber der Version FTK 2 erfolgreich absolviert werden.



## Summary of the research findings

In the preceding project with funding number 02E11041, the FTK simulator for thermal-hydro-logic-mechanical coupled simulations considering two-phase-flow processes had been developed by Clausthal University of Technology (TUC), and it has also been verified to a certain, rudimentary extent since then. Verification here means the first stage of a quality assurance process initially focussing on confirming the numerical viability of the simulation results. The verification so far has primarily involved analytical solutions of the differential equations on which the simulated processes are based, as well as comparative simulations using the FLAC<sup>3D</sup> simulator and the TOUGH-FLAC simulator from the Lawrence Berkeley National Laboratory in California. Analytical solutions of the differential equations can however only be derived under very strong simplifications – which holds already for isothermal processes and in particular when incorporating two-phase flow (H<sup>2</sup>M) – and therefore provide a very limited basis for verification on the one hand. On the other hand, other organisations with analogous simulators are being confronted by similar tasks. For these reasons, TUC initiated an international co-operation project to implement systematic comparative simulations on TH<sup>2</sup>M processes. Six working groups intend to participate in this project and carry out simulations on different model examples with a rising level of complexity in order to verify the simulators which they use and, in part, which they have implemented and/or further developed on their own (simulator benchmarking). The simulation results are subsequently to be first contrasted to one another and discussed at internal technical meetings, and then also presented at public congresses. It is expected that the benchmarking project will result in improvements in the efficiency, performance, and reliability of each of the simulators, as well as boosting the sensitivity and technical qualifications of each of the operators for the processing of such complex problems with bilateral coupled process simulations and the many resulting safety-relevant interactions in the development of the repository near field with the isolating rock zone.

In the pre-project worked on here from July 2016 to April 2017, the preparatory work undertaken by TUC for the research project “BenVaSim” (funded since May 2017 under the funding number 02E11567A as a joint project with the Society for Plant and Reactor Safety, GRS) looked at several aspects. The first aspect of the preparatory work concerns research work on the current international state-of-the-art with respect to benchmarking, and in particular, simulator benchmarking. In a large number of benchmarking projects undertaken in the past by international research institutes and organisations in the context of radioactive waste disposal, the



primary objective was to validate their own internal approaches to the modelling of the analysed repository sub-systems on the basis of measurement curves from field work and laboratory investigations. Validation here, as the second stage of the quality assurance process, means verifying the fundamental physical suitability of the used simulation software to model the relevant processes. However, because of the interactions that take place in complex coupled processes, the validation process needs to take into consideration that the individual processes are not always clearly identifiable, and that in a strict sense, the validation concerns the processes overall focussed on the field of observation, but not each individual process and the forecasting reliability when extrapolating to other background conditions. In addition to these validations based on laboratory and field testing, cross-organisational simulator benchmarkings have also been undertaken where the conditions for the simulation models including the underlying differential equations had been specified in advance, and therefore primarily the numerical solution methods determined the numerical results and the differences between them. TUC is, however, not aware of any analogous simulator benchmarkings involving H<sup>2</sup>M simulations.

The second aspect of the preparation for the benchmarking in the BenVaSim project concerns the presentations by the partner organisations, as part of bilateral technical discussions with TUC, of the simulators they intend to use in the project. It has been found that the basic equations for the thermal, hydrologic, and mechanical processes are implemented in a widely identical manner in the simulators, and mechanical constitutive models are also available to the necessary degree for compiling an adequate range of different simulation scenarios. First suggestions for simulation scenarios could therefore already be accomplished by TUC.

The third aspect of the preparations for the benchmarking process concerns the work undertaken to boost the efficiency of the FTK simulator. This involved learning the ropes of the source code of TOUGH2-MP, which is very different compared to TOUGH2 due to its comprehensive parallelisation code passages. The modifications to the TOUGH2 simulator previously carried out by TUC have therefore been successfully transferred to the parallelised TOUGH2-MP simulator as a result. First test runs on the FTK 3.00 simulator created in this way have been successfully completed with respect to maintaining the functionality with regards to the FTK 2 version.



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Aufgabenstellung und Ziele des BenVaSim-Projekts .....</b>	<b>11</b>
1.1	Rahmenbedingungen und Zielstellungen .....	11
1.2	Zielstellungen des Benchmarkings für den Projektinitiator .....	14
1.3	Bezug der mit dem BenVaSim-Projekt verbundenen Forschungsarbeiten zu den förderpolitischen Zielen des BMWi-Förderprogramms .....	16
1.4	Arbeitsprogramm für das BenVaSim-Vorprojekt .....	18
<b>2</b>	<b>Zum Stand von Wissenschaft und Technik .....</b>	<b>21</b>
2.1	Überblick über den internationalen Wissensstand .....	21
2.2	Erfahrungen aus anderen Benchmarking-Projekten im Forschungsbereich der untertägigen Endlagerung radioaktiver Abfälle .....	23
2.2.1	Überblick über bereits erfolgte Benchmarking-Projekte .....	23
2.2.2	Beispiel DECOVALEX .....	28
2.2.3	Beispiel MoMaS .....	42
2.2.4	Schlussfolgerungen aus den Benchmarking-Erfahrungen und Konsequenzen für das BenVaSim-Projekt .....	44
2.3	Bisherige Arbeiten und Erfahrungen des Vorhabensbearbeiters .....	47
<b>3</b>	<b>Zum internationalen Benchmarking-Projekt „BenVaSim“ .....</b>	<b>50</b>
3.1	Grundstruktur des BenVaSim-Projekts .....	50
3.1.1	Genereller Projektablauf .....	50
3.1.2	Gesamtziele des Projekts .....	51
3.1.3	Teilnehmer, Koordination und Organisation .....	51
3.1.4	Simulatoren und Modellbeispiele .....	53
3.1.5	Berechnungen, Auswertungen und Gegenüberstellung der Ergebnisse .....	55
3.2	Simulatoren der Projektteilnehmer .....	56
3.2.1	Übersicht zu den eingesetzten Simulatoren .....	56
3.2.2	Zum Simulator FLAC <sup>3D</sup> für geomechanische Aufgabenstellungen .....	57
3.2.3	Zum Simulator TOUGH2 für geothermohydraulische Aufgabenstellungen .....	64
3.2.4	Der FTK-Simulator in der bis dato bestehenden Version 2 .....	71
3.2.5	Die Simulatoren TOUGH-FLAC und TFC .....	83
3.2.6	Der Simulator CODE_BRIGHT .....	88



---

3.2.7	Der Simulator OpenGeoSys.....	95
3.2.8	Der Simulator COMSOL Multiphysics .....	100
3.2.9	Gegenüberstellung der Eigenschaften der Simulatoren .....	103
<b>4</b>	<b>Zur Weiterentwicklung des FTK-Simulators im Hinblick auf eine Effizienzsteigerung insbesondere für größere Berechnungsmodelle .....</b>	<b>111</b>
4.1	Motivationen für die Weiterentwicklung des FTK-Simulators .....	111
4.2	Der parallelisierte Simulator TOUGH2-MP .....	112
4.3	Erweiterung der FTK-Simulatorenkopplung auf TOUGH2-MP .....	115
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung der Ergebnisse des BenVaSim-Vorprojekts und Ausblick auf das folgende Hauptprojekt.....</b>	<b>122</b>
<b>6</b>	<b>Danksagung .....</b>	<b>125</b>
<b>7</b>	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>126</b>



## 1 Aufgabenstellung und Ziele des BenVaSim-Projekts

### 1.1 Rahmenbedingungen und Zielstellungen

Seit mehreren Jahrzehnten werden in Deutschland umfangreiche Untersuchungen zum Thema Endlagerung wärmeentwickelnder hochradioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Gesteinsformationen durchgeführt, wobei neben Steinsalz seit mehr als zehn Jahren zunehmend auch Tonstein als Wirtsgestein Gegenstand dieser Untersuchungen geworden ist und zukünftig aufgrund der Rahmenbedingungen des Standortauswahlgesetzes verstärkt sein wird. Im Gegensatz zum Salinargebirge liegt dabei im Tonsteingebirge bereits im geogenen Zustand ein vernetzter Porenraum vor, der primär auch noch als wassergesättigt anzusehen ist und einem hydraulischen Gradienten unterliegt. Aufgrund von hydromechanischen Wechselwirkungen wird daher das Tragverhalten des Tonsteingebirges nach Auffahrung von Hohlräumen auch signifikant von geohydraulischen Prozessen mitbeeinflusst (Porendruckabbau, Entsättigung, Trocknungsrissebildung, Resättigung, Effektivspannungsänderung, Entfestigung, Gefügeauflockerung, Permeabilitätsanstieg, Quelldruckentwicklung, ...). In der Nachbetriebsphase können sich im Endlagersystem bei beiden Wirtsgesteinstypen aufgrund von Korrosions- und Biodegradationsprozessen an Behältern, Ausbaumitteln und Abfällen Gase wie Methan und Wasserstoff bilden, die dann zu Teilsättigungen im Porenraum führen und das Strömungsverhalten beider fluiden Phasen durch Raumeinnahme, Druckanstieg und physikalische Wechselwirkungen mit dem Porenwasser maßgeblich mitbeeinflussen (Zweiphasenströmung). Diese Korrosions- und Degradationsprozesse werden durch das Vorhandensein von Wasser und damit insbesondere im Tonsteingebirge, in dem bereits im Grundszenario Formationswasser präsent ist, begünstigt. Zudem werden in der Nachbetriebsphase thermische Prozesse durch die Wärmeentwicklung der hochradioaktiven Abfälle induziert, welche ihrerseits mit den geohydromechanischen Prozessen interagieren. Somit muss im Hinblick auf eine das Langzeitverhalten eines Endlagers betrachtende Sicherheitsanalyse aufgrund der Vielschichtigkeit und Komplexität der multiphysikalischen Prozesse das thermisch-hydraulisch-mechanisch (THM) gekoppelte Verhalten insbesondere des jeweiligen einschlusswirksamen Gebirgsbereiches bestehend aus dem Wirtsgestein mit der geologischen Barriere und dem geotechnischen Barrieresystem physikalisch modelliert und numerisch simuliert werden. Dabei ist eine Einbeziehung von Zweiphasenströmungsprozessen (TH<sup>2</sup>M) aufgrund der durch chemische und biologische Abbauprozesse langfristig zu erwartenden Gasentwicklung als unumgänglich anzusehen – sowohl im Salinar- wie auch im Tonsteingebirge.



In Deutschland sind derzeit bereits mehrere Simulatoren im Einsatz, mit deren Hilfe das TH<sup>2</sup>M-gekoppelte Verhalten von Endlagersystemen bzw. Endlagerteilsystemen unter teilweise starken Vereinfachungen der Endlagerbergwerksgeometrie und/oder Einschränkungen an die Abbildung der physikalischen Prozesse und an die verwendeten Stoffmodelle simuliert werden kann. Für eine hinreichend zuverlässige Prognose des Endlagersystemverhaltens bedarf es grundsätzlich qualitätsgesicherter, d.h. in ihrer Funktionalität verifizierter und in ihrer Aussagekraft validierter Simulationswerkzeuge. Für eine derartige Qualitätssicherung bietet ein den Anforderungen entsprechend ausgestaltetes und möglichst breit angelegtes Benchmarking hierzu einen national und international bewährten Ansatz. Im Forschungsbereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle existieren oder existierten bereits diverse Projekte mit der Zielstellung eines Vergleichs von rechnerischen Erfahrungen und Fertigkeiten unterschiedlicher Organisationen (Institutionen wie Unternehmen) wie z.B. zum In-situ-Test FEBEX im UTL Grimsel (Schweiz), *Alonso et al. (2005)*, das Verbundvorhaben „Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen im Steinsalz“, *Hampel et al. (2016)*, oder auch das bereits seit 1992 bestehende Projekt DECOVALEX, *Tsang et al. (2009)*, *Hudson & Jing (2013)*. Integral zeigen die Erfahrungen, dass derartige Kooperationsprojekte sowohl den Erfahrungsaustausch zwischen Organisationen unterstützen wie auch neue wissenschaftlichen Erkenntnisse generieren, was durch das langjährige Fortbestehen von mehreren dieser Benchmarking-Projekte deutlich unterstrichen wird. Die Erfahrungen zeigen aber auch, dass die vornehmlich an Benchmarks in Form von Messdaten aus Labor- oder Feldversuchen orientierten Benchmarking-Vorhaben bei der Simulation mechanischer und hydraulischer Prozesse und insbesondere bei Verzicht auf unterstützende Curve-fitting-Prozeduren auf erhebliche Unterschiede in den Ergebnissen der beteiligten Simulatoren führen.

Grundsätzlich ist es aufgrund der voneinander abweichenden numerischen Strukturen und Berechnungsverfahren, die den unterschiedlichen im Einsatz befindlichen TH<sup>2</sup>M-gekoppelten Simulatoren zugrunde liegen (Diskretisierung der kontinuierlich formulierten physikalischen Differenzialgleichungen, Löser für lineare Gleichungssysteme, Kopplungsbeziehungen, zeitgleiche oder sequenzielle Lösung der Prozessgleichungen), erstrebenswert, nicht nur einen einzigen Simulator für die Langzeitsicherheitsanalyse eines Endlagers in Deutschland zur Verfügung zu haben. Gerade auch angesichts der vorliegenden äußerst komplexen physikalischen Prozesse eines Endlagersystems birgt die Anwendung nur eines numerischen Simulators stets ein gewisses Risiko für Verfahrensfehler, d.h. für schon allein durch das Berechnungsverfahren bedingte



Diskrepanzen zur (unbekannten) exakten Lösung der Differenzialgleichungen, so dass ein vergleichender bzw. auch konkurrierender Einsatz mehrerer Simulatoren zur Analyse des Langzeitverhaltens und hier insbesondere zunächst der fluiddynamischen Prozesse eines Endlagersystems zu einer gesteigerten Prognosesicherheit führen würde. Mit Blick auf die neugegründete bundeseigene Gesellschaft zur Planung und zum Betrieb von Endlagern (Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH, BGE) und der in jüngerer Zeit erfolgten Errichtung einer Genehmigungs- und Aufsichtsbehörde für Endlager in Deutschland (Bundesamt für kerntechnische Entsorgungssicherheit, BfE) sollten dabei national insgesamt bereits mindestens zwei voneinander unabhängig entwickelte und auch angemessen qualitätsgesicherte TH<sup>2</sup>M-Simulatoren erforderlich sein.

Mit dem Projekt „BenVaSim“ soll die Verifizierung und Validierung von mehreren, teilweise bereits für die Bearbeitung realer Endlagerprojekte eingesetzten Simulatoren vorangetrieben werden, so dass im langfristigen Ergebnis zukünftig in Deutschland mehrere voneinander unabhängige, in ihrer grundsätzlichen Funktionalität validierte Simulatoren für die Analyse der langfristigen mechanischen, thermischen und insbesondere fluiddynamischen Prozesse in Endlagern sowohl im Tonstein- wie auch im Salinargebirge verfügbar sein werden. Diese Forschungsarbeiten zur Qualitätssicherung sollen in einem internationalen Rahmen durchgeführt werden, um auch die Erfahrungen internationaler Organisationen im Bereich der Simulation des Endlagersystemverhaltens in den nationalen Kenntnisstand miteinfließen zu lassen (und vice versa natürlich auch den Kenntnisstand der teilnehmenden internationalen Organisationen durch die Forschungsarbeiten dieses Vorhabens zu erweitern). Die durch die Verifizierungs- und Validierungsarbeiten erzielte Verbesserung der Prognosezuverlässigkeit kann dazu beitragen, zunächst die Robustheit der physikalischen Modellierungsansätze und ihrer Umsetzung in Prozessmodellen und Simulatoren und dadurch dann auch das Vertrauen in die prognostischen Aussagen zum Verhalten eines Endlagers zu stärken und auf diese Weise einen positiven Einfluss auf die Akzeptanz zu entfalten. Darüber hinaus sollten derartig qualitätsgesicherte Simulatoren auch für das geplante Standortauswahlverfahren in Deutschland von Nutzen sein, um im Rahmen von standortbezogen durchzuführenden Endlagersystemvergleichen schon im Auswahlprozess angemessen zuverlässig provisorische vergleichende Untersuchungen auf modelltheoretischer Grundlage durchführen zu können. Diese Anforderung gilt insbesondere für die Prozesssimulation im Tonsteingebirge, die aufgrund des im Gestein vorhandenen Porenwassers gegenüber dem Salinargebirge noch verstärkt durch hydraulisch induzierte Prozesse mit vielfältigen Auswirkungen auf das Barrierenverhalten geprägt ist.



## 1.2 Zielstellungen des Benchmarkings für den Projektinitiator

In einem in jüngerer Zeit abgeschlossenen Forschungsvorhaben des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) mit dem Förderkennzeichen 02E11041 sind vom Initiator des BenVaSim-Projekts, dem Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik der Technischen Universität Clausthal (TUC), zwei Simulationsprogramme, von denen eines auf geomechanische und das andere auf geothermohydraulische Prozesssimulationen mit Zweiphasenfluss (FLAC<sup>3D</sup>/TOUGH2) spezialisiert ist, zu einem neuen TH<sup>2</sup>M-Simulator gekoppelt worden, der als FTK-Simulator bezeichnet wird, *Lux et al. (2015)*. Neben der Entwicklung und Implementierung dieses FLAC<sup>3D</sup>-TOUGH2-Kopplungs-Simulators sind auch bereits bis zu einem gewissen ersten, als noch eher rudimentär anzusehenden Grad Arbeiten zu seiner Verifizierung und Validierung erfolgt, die durch das BenVaSim-Projekt systematisch ausgebaut und vertieft und auch in den nationalen und internationalen Raum weiter ausgedehnt werden sollen. Für das Benchmarking sind hierbei sowohl zunächst abstraktere Modellbeispiele mit simplen Modellgeometrien und einer analytischen Lösbarkeit der unterliegenden physikalischen Gleichungen wie dann auch realitätsnähere und komplexere generische Modellbeispiele für Endlagerteilstrukturen vorgesehen. Zudem wird eine Weiterentwicklung des FTK-Simulators im Rahmen des BenVaSim-Projektes angestrebt, um den Anschluss an den Entwicklungsstand internationaler Simulatoren zu erlangen bzw. nicht zu verlieren sowie ggf. den Anwendungsbereich des FTK-Simulators zu erweitern.

Bezogen auf die sich auf die TUC beziehenden Teile des Benchmarkings bestehen die Gesamtziele somit in der Qualitätssicherung des vom Antragsteller eingesetzten FTK-Simulators sowie in der Fortführung bzw. Initiierung von Kooperationen und in der Kontaktpflege zu anderen Organisationen im Bereich der Endlagerforschung (intensivierter Erfahrungsaustausch und vertiefte Forschungskooperation). Weitere Ziele des Vorhabens sind zudem beim Projektinitiator in seiner Eigenschaft als universitäre Einrichtung die Nachwuchsförderung und der Kompetenzerhalt im Rahmen von Promotions- und Studienarbeiten sowie die Bereitstellung der im Rahmen der physikalischen Abbildung als numerisch korrekt bewerteten Simulationsergebnisse aus diesem Vorhaben als verifizierte Benchmarks für künftige Benchmarkings im Rahmen eigener und auch anderer unabhängiger Forschungsprojekte und Weiterentwicklungen.

Als wesentliche Teilziele des übergeordneten Gesamtziels der erweiterten und vertieften Qualitätssicherung sind zu nennen:



- vertiefte, umfassende Verifizierung des FTK-Simulators hinsichtlich der Simulation von TH<sup>2</sup>M-Prozessen in Fortführung der in *Lux et al. (2015)* und *Lux et al. (2018)* begonnenen ersten Verifikationsarbeiten (geeignete Modelldiskretisierung, überzeugende Qualität der numerischen Ergebnisse),
- Validierung des FTK-Simulators, d.h. Beleg der generellen physikalischen Plausibilität der Berechnungsergebnisse (= Validierung des physikalischen Modells – d.h. Diskretisierung sowie physikalische Ansätze mit Gleichungen und Parametern – bei verifiziertem Simulator),
- Weiterentwicklung des FTK-Simulators in der derzeitigen Version 2 mit Fokus auf zentrale Prozesse, die von anderen am Benchmarking beteiligten Simulatoren bereits numerisch abgebildet werden können, insbesondere hinsichtlich einer für ein generisches Benchmarking prinzipiell erforderlichen Vergleichbarkeit der Simulationsergebnisse (mit der Anisotropie der H- und T-Prozesse als diesbezüglich hervorzuhebendes bedeutendes Beispiel),
- Identifizierung von noch bestehenden Schwachstellen in der programmtechnischen Implementierung zur Verbesserung der numerischen Effektivität (z.B. Kopplungsroutinen),
- Erfahrungsaustausch mit den Partnerorganisationen des Benchmarkings sowie
- in hier untergeordneter Weise Arbeiten zur Validierung des FTK-Simulators anhand von Messdaten aus realen Messungen aus In-situ- oder laborativen Untersuchungen.

Das Ziel des durch den vorliegenden Bericht dokumentierten BenVaSim-Vorprojekts ist vor diesem Hintergrund die Durchführung vorbereitender Maßnahmen für das BenVaSim-Hauptprojekt. Teilziele sind dabei:

- wissenschaftliche und organisatorische Vorbereitungen (Recherche zu Benchmarkings und zu den im BenVaSim-Projekt eingesetzten Simulatoren / Absprachen mit den Projektpartnern zu ersten Details zum Arbeitsprogramm) sowie
- eine erste programmiertechnische Weiterentwicklung des eigenen Simulationsinstrumentariums durch Kopplung der Simulatoren FLAC<sup>3D</sup> und TOUGH2-MP zum Simulator FTK 3.00 (effizienzsteigernde Modifikationen am FTK-Simulator).



### 1.3 Bezug der mit dem BenVaSim-Projekt verbundenen Forschungsarbeiten zu den förderpolitischen Zielen des BMWi-Förderprogramms

Das BMWi fördert bereits seit mehreren Jahrzehnten Forschungsarbeiten im Bereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen in Deutschland. Auch im aktuellen Förderkonzept „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle (2015-2018)“ (*BMWi & PTKA-WTE, 2015*) stellen sowohl die anwendungsbezogene Grundlagenforschung mit Fokus auf wärmeentwickelnde Abfälle wie auch Arbeiten zur Entwicklung von Methoden und Techniken für endlagerspezifische Maßnahmen zentrale förderpolitische Ziele dar. Im gesamten bisherigen Forschungszeitraum von inzwischen mehreren Jahrzehnten stand dabei das Geosystem Salinargebirge mit insbesondere Steinsalz als Endlagerwirtsgestein im Vordergrund der Untersuchungen, so dass in Deutschland ein umfangreicher Kenntnisstand zu diesem Wirtsgesteinstyp erarbeitet worden ist.

Seit einem guten Jahrzehnt wird mit dem Vorschlag des AkEnd zu einem wirtsgesteinsunabhängigen Standortauswahlverfahren allerdings auch in Deutschland den Nachbarländern Schweiz und Frankreich folgend das Tonsteingebirge als ein für die Endlagerung grundsätzlich geeignetes Geosystem angesehen, so dass auch Tongesteine zunehmend intensiver als alternative Endlagerwirtsgesteine untersucht werden. Dieser Ansatz des AkEnd eines im Grundsatz wirtsgesteinsunabhängigen Standortauswahlprozesses wird auch durch das im Jahr 2013 verabschiedete und im Jahr 2017 nach den Vorschlägen und Handlungsempfehlungen der *Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe (2016)* konkretisierte Standortauswahlgesetz (StandAG) weiterverfolgt und dahingehend erweitert, dass nun auch Kristallingesteine in den Auswahlprozess einbezogen werden. In der Vergangenheit ist von deutschen Organisationen auch schon anwendungsbezogene Grundlagenforschung zu einer Endlagerung im Kristallingestein betrieben worden, wenngleich in wesentlich beschränkterem Maß und in den letzten Jahren vornehmlich mit Fokus auf die geotechnische Barriere (Bentonit) mit Blick auf eine Übertragbarkeit der Forschungsergebnisse auf die Endlagerung in anderen Wirtsgesteinstypen. Mit dem Ziel einer Vergleichbarkeit der drei Formationstypen Salinar-, Ton- und Kristallingestein hinsichtlich ihrer endlagerspezifischen Eigenschaften und dann weiter ihrer formationsspezifischen Eignung für den Bau und Betrieb sowie die Stilllegung mit dem langzeitsicheren Verschluss eines Endlagers insbesondere für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle besteht aus Sicht des BMWi also ein vorrangiger Bedarf in der Erweiterung des Kenntnisstandes zum ther-



misch-hydraulisch-mechanisch-chemischen (THMC) Verhalten der beiden bis dato noch weniger untersuchten Formationstypen Tonstein und Kristallin auf das Niveau des bereits vorhandenen Kenntnisstandes zu Salinargesteinen. Bei der Kenntnisstanderweiterung ist insbesondere das Tonsteingebirge mit seinen materialspezifischen Eigenschaften und seinem geotektonischen Strukturbau im Hinblick auf die Realisierung einer geologischen Barriere vorrangig zu bearbeiten, während ein Endlager im Kristallingebirge dagegen nach heutiger Ansicht wohl eher in Bezug auf die Gewährleistung der Langzeitsicherheit auf technischen und geotechnischen Barrieren fußen würde (Behälter und Bentonitversatz).

Die im BenVaSim-Projekt durchzuführenden Arbeiten zur Zweiphasenflusssimulation sind vor diesem Hintergrund vornehmlich auf das Tonsteingebirge mit dem von vornherein schon vorhandenen vernetzten und wassergesättigten Porenraumgefüge in der Gesteinsmatrix fokussiert, schließen aber das Salinargebirge in der Phase nach Verschluss nicht aus (Fluidinfiltration).

Die im Rahmen des hier bearbeiteten BenVaSim-Vorprojekts (Förderkennzeichen 02E11506) bereits erfolgten und die im Rahmen des nachfolgenden BenVaSim-Hauptprojekts (Förderkennzeichen 02E11567A) weiter vorgesehenen Arbeiten der TUC sind dem Forschungs- und Entwicklungsbereich 4 (Sicherheitsnachweis) des aktuellen BMWi-Förderkonzepts zuzuordnen und dort primär dem nachstehenden Forschungs- und Entwicklungsfeld:

*FuE-Feld 4.3 (Systemanalysen und Werkzeuge der Sicherheitsanalysen)*

- Weiterentwicklung und Aktualisierung der Methoden und Rechenprogramme für Sicherheitsanalysen der Betriebsphase / für Langzeitsicherheitsanalysen,
- Orientierende Systemanalysen für Endlager in unterschiedlichen Wirtsgesteinen.

Mit Blick auf die zu einem Benchmarking-Projekt gehörenden kritischen Vergleiche von Simulationsergebnissen der Teilnehmer und die damit verbundenen Ansätze zur Identifizierung der Ursachen für Diskrepanzen in den Ergebnissen wird auch noch ein weiteres Forschungs- und Entwicklungsfeld aus *BMWi & PTKA-WTE (2015)* in das BenVaSim-Projekt einbezogen:

*FuE-Feld 4.1 (Phänomene, Prozesse und Modelle)*

- Weiterentwicklung des Verständnisses zu den im Endlagersystem und in der Biosphäre ablaufenden Prozessen.

Das BenVaSim-Hauptprojekt ist von der TUC gemeinschaftlich mit dem Projektpartner Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH, Bereich Endlagersicherheitsforschung



(Unternehmensstandort Braunschweig, GRS BS), als Verbundprojekt initiiert worden. Das von der GRS BS zu bearbeitende Forschungsvorhaben zum BenVaSim-Projekt (Förderkennzeichen 02E11567B) verfolgt dabei primär das zuletzt genannte förderpolitische Ziel des BMWi, da dort im Gegensatz zum Vorhaben der TUC keine Weiterentwicklungen an dem für die Projektbearbeitung vorgesehenen Simulator vorgesehen sind.

#### **1.4 Arbeitsprogramm für das BenVaSim-Vorprojekt**

Gegenstand des BenVaSim-Projekts sind eine Erarbeitung und Gegenüberstellung von Berechnungsergebnissen unterschiedlicher Arbeitsgruppen zu einheitlichen Modellbeispielen für Endlagerteilsysteme zum Zweck der Verifizierung und Validierung der jeweiligen THM-Simulatoren und aus Sicht der TUC insbesondere des FTK-Simulators (Qualitätssicherung in Deutschland). Die TUC übernimmt für dieses Projekt die koordinierende Aufgabe. Die Arbeiten zu den beiden Forschungsvorhaben der TUC (Vor- und Hauptprojekt) umfassen dazu einerseits

- gemeinschaftlich orientierte wissenschaftliche und organisatorisch-administrative Arbeiten zur Vorbereitung interner Fachtreffen, zur gemeinsamen Arbeitsprozessabstimmung und vergleichenden Ergebnisauswertung und zur Zusammenführung und Dokumentation der Resultate des Benchmarkings sowie andererseits
- individuelle wissenschaftlich-technische Arbeiten zur Recherche von bestehenden Kenntnissen zum Forschungsthema, zur Vorbereitung der abzustimmenden Simulationsbeispiele, zur Durchführung und Auswertung eigener numerischer Simulationen mit dem hauseigenen FTK-Simulator sowie zur Implementierung von Modifikationen in diesen Simulator zur Verbesserung seiner Leistungsfähigkeit.

Die Arbeiten, die im Rahmen des BenVaSim-Vorprojekts durchgeführt worden sind, haben sich auf die Recherche bestehender Informationen, auf vorbereitende Maßnahmen für das BenVaSim-Hauptprojekt sowie auf Aspekte der Simulatorweiterentwicklung konzentriert und können in die folgenden Arbeitspakete (AP) untergliedert werden:



- AP 1: Aufarbeitung der Arbeiten der TUC zu THM-Simulationen mit dem FTK-Simulator,
- AP 2: Vorstellung der beteiligten Simulatoren und einschlägiger Erfahrungen der Partner,
- AP 3: Literaturrecherche zu Benchmarkings und TH<sup>2</sup>M-Simulatoren / offene Fragen,
- AP 4: Weiterentwicklung des FTK-Simulators,
- AP 5: vorbereitende Maßnahmen für das Benchmarking,
- AP 6: Dokumentation der Arbeiten und Abschlussbericht.

Die vorstehend genannten Arbeitspakete sind bei näherer Betrachtung wie folgt zu beschreiben:

- AP 1: Aufarbeitung der bestehenden Unterlagen und der bereits durchgeführten Arbeiten an der TUC zu numerischen Simulationen eines (T)HM-gekoppelten Materialverhaltens mit dem FTK-Simulator / Zusammenstellung eines Handouts für die Partnerorganisationen.
- AP 2: Fachgespräche mit den vorgesehenen Partnerorganisationen zur Vorstellung der zum Benchmarking herangezogenen Simulatoren der Partner und der Fähigkeiten dieser Simulatoren (insbesondere implementierte TH<sup>2</sup>M-Prozesse und mechanische Stoffmodelle) / Aufarbeitung der Unterlagen zu den Simulatoren und zu den numerischen Erfahrungen der Partnerorganisationen mit den Simulatoren.

Die unter AP 1 genannten Unterlagen und Arbeiten beinhalten Berichte und Veröffentlichungen, die im Rahmen der Forschungsvorhaben 02E11041 (Entwicklung des FTK-Simulators, BMWi) und 02S9082A (ENTRIA, BMBF) und durch die bisher erfolgten Kooperationsarbeiten des Antragstellers mit dem LBNL entstanden sind, sowie Arbeiten im Zusammenhang mit Dissertationen involvierter Lehrstuhlmitarbeiter. Im Rahmen von AP 2 sind Fachgespräche mit Partnerorganisationen durchgeführt worden, in denen von den Partnern Eigenschaften und Erfahrungen im Zusammenhang mit den beteiligten Simulatoren vorgestellt worden sind. Das Ziel dieser beiden Arbeitspakete AP 1 und AP 2 sind zunächst die Identifizierung und dann die Gegenüberstellung der mit den eingesetzten Simulatoren in rechnerischen Simulationen unterstützten Prozesse und physikalischen Zusammenhänge im Hinblick auf die Ausarbeitung von geeigneten Modellbeispielen in hier AP 5 bzw. dann gemeinschaftlich im BenVaSim-Hauptprojekt.



AP 3: Recherche, Beschaffung und Dokumentation international verfügbarer Literatur zu Benchmarkings und TH<sup>2</sup>M-gekoppelten Simulationen und Simulatoren (Stand von Wissenschaft und Technik) sowie Identifizierung von Implementierungslücken und offenen Fragestellungen in diesem Kontext.

Die bezüglich des FTK-Simulators im Rahmen von AP 3 festgestellten Implementierungslücken sind dann im Hauptprojekt zu beheben, so sie für das Benchmarking relevant sind.

AP 4: Weiterentwicklung des FTK-Simulators durch den Einsatz von TOUGH2-MP zur Effizienzsteigerung inkl. Durchführung von Testsimulationen zur Verifizierung des weiterentwickelten Simulators.

Mit Blick auf die bei größeren Modellgeometrien erfahrungsgemäß deutlich längere Dauer von Berechnungsvariationen mit dem sequenziell gekoppelten FTK-Simulator 2 wird eine Reduzierung der Simulationsdauer durch den Einsatz des parallelisierten Simulators TOUGH2-MP anstelle von TOUGH2 angestrebt (→ FTK-Simulator 3.00).

AP 5: Recherche und Zusammenstellung von Materialparametern sowie von Entwürfen für Berechnungsvariationen in Vorbereitung für das Benchmarking im Hauptprojekt.

Sowohl die (generischen) Parametersätze zu TH<sup>2</sup>M-Prozessen im Ton- und Salinargestein wie auch die Berechnungsmodelle und -variationen sind im Rahmen des Hauptprojekts von den BenVaSim-Projektpartnern gemeinsam auf der Grundlage von Vorschlägen der TUC als Projektkoordinator abzustimmen. Zu diesem Zweck ist zunächst eine orientierende Recherche zu realistischen, lokations- bzw. materialspezifischen Parametern erforderlich gewesen.

AP 6: Dokumentation der Arbeiten sowie Verfassen eines Abschlussberichts zum Vorprojekt.



## 2 Zum Stand von Wissenschaft und Technik

### 2.1 Überblick über den internationalen Wissensstand

Das in Deutschland bislang noch weniger untersuchte, aktuell aber neben Steinsalz und Kristallingestein als optionales Endlagerwirtsgestein betrachtete Tongestein wird in Nachbarländern wie der Schweiz oder Frankreich als Endlagerwirtsgestein favorisiert und ist dort somit auch entsprechend intensiver untersucht worden. Im Ergebnis dieser Untersuchungen werden im Tongestein unter Endlagereinwirkungen im Lauf der Zeit von Baubeginn bis weit in die Zeit nach Verschluss simultan hochkomplexe thermische, hydraulische und mechanische Prozesse induziert, die auch in unterschiedlichen Wechselwirkungen miteinander stehen, so dass daraus folgend im Geosystem ein- bzw. zweiseitig gekoppelte Prozessverläufe zu erwarten sind. Die relevanten Prozesse sind nicht nur für eine als Endlagerstandort infrage kommende Lokation über laborative Untersuchungen zu identifizieren und zu quantifizieren, sondern als Grundlage für Langzeitsicherheitsanalysen sowohl im Rahmen eines Standortauswahlverfahrens wie auch eines finalen Genehmigungsverfahrens für einen Standort unter den zu erwartenden Endlagereinwirkungen auch prädiktiv numerisch zu simulieren.

Nationale und internationale Forschungsarbeiten zum Prozessverständnis im Tongestein haben sich bislang grundsätzlich vornehmlich auf die folgenden Aspekte konzentriert:

- laborativ basierte Identifizierung und Charakterisierung von thermischen, hydraulischen und/oder mechanischen Prozessen im Tongestein zur Verständnisbildung und Verständniserweiterung,
- In-situ-Experimente zu Teilkomponenten von Endlagersystemen im Tonsteingebirge mit umfassender Messung von thermischen, hydraulischen und/oder mechanischen Zuständen im Barrierengebirge (Tongestein) und in den geotechnischen Systemkomponenten (Bentonitversatz und -verschlussbauwerke),
- Modellierung des Materialverhaltens über adäquate prozessbeschreibende physikalische Gleichungen und insbesondere im mechanischen Bereich die Entwicklung von gesteinspezifischen Stoffmodellen, mit denen das teilweise bereits schon sehr komplexe mechanische Verhalten des Geomaterials Tongestein, aber auch des Versatzmaterials Bentonit angemessen beschrieben werden kann,



- Nutzung und (Weiter-)Entwicklung von numerischen Simulatoren zur Lösung der bei der Modellierung erhaltenen Gleichungen und in diesem Zusammenhang auch die Verifizierung von Simulator-Modifikationen (z.B. Stoffmodellimplementierungen, Kontrollmechanismen zur numerischen Stabilität) anhand relativ einfacher Modellbeispiele sowie
- Validierung von rechnerischen Herangehensweisen und Stoffmodellen anhand von Simulationen von Labor- und Feldexperimenten und anschließendem Abgleich von ausgewählten Simulationsergebnissen mit Messwertkurven, auch im Rahmen von Benchmarkings, z.B. FEBEX, *Alonso et al. (2005)*; „Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen im Steinsalz“, *Hampel et al. (2016)*, und DECOVALEX, *Hudson & Jing (2013)*.

Ergebnisse rechnerischer Simulationen zur Abbildung der multiphysikalischen Prozesse in Endlagersystemen unterliegen allerdings naturgemäß großen Schwankungsbreiten, so dass Maßnahmen zur Qualitätssicherung erforderlich werden. Grundsätzlich bestehen folgende Möglichkeiten zur Qualitätssicherung:

- (a) Überprüfungen im Rahmen von konkreten Projekten nach dem Vier-Augen-Prinzip,
- (b) Benchmarking unabhängig von konkreten Projekten im Rahmen der angewandten Grundlagenforschung.

Im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalysen für Standortauswahl- und Genehmigungsverfahren wird üblicherweise zur Qualitätssicherung entsprechend (a) das sogenannte Vier-Augen-Prinzip angewandt, wie z.B. in *Lorenzo Sentís & Leuz (2012)*. Generell bleibt dabei jedoch die Frage nach Ursachen für Unterschiede in den Simulationsergebnissen eher unbeantwortet. Vielmehr werden dann oft bei implizit zugebilligter grundsätzlicher Korrektheit der numerischen Befunde (Zustandsgrößen) die nachweisbezogen ungünstigeren Simulationsergebnisse in den Genehmigungsprozess eingeführt.

Zur grundsätzlichen Qualitätssicherung von Simulatoren werden eher seltener entsprechend Vorgehensweise (b) auch projektunabhängige Benchmarkings vorgenommen. Dabei können die folgenden Strategien angewandt werden:



- (b1) Verifikation von numerischen Simulatoren zur Lösung der die jeweilige Aufgabenstellungen beschreibenden nichtlinearen Differenzialgleichungen und in diesem Zusammenhang auch die Verifikation von Simulator-Modifikationen (z.B. Überprüfung von Stoffmodellimplementierungen und numerischen Algorithmen) anhand relativ einfacher Modellbeispiele sowie
- (b2) Validierung von Simulatoren über Simulationen von Labor- und Feldexperimenten und anschließendem Abgleich von ausgewählten Simulationsergebnissen mit Messwertkurven (Überprüfung der grundsätzlichen geotechnischen Eignung), mitunter auch im Rahmen von Vorausberechnungen vor Erhalt der Messwertkurven („blind predictions“).

## **2.2 Erfahrungen aus anderen Benchmarking-Projekten im Forschungsbereich der untertägigen Endlagerung radioaktiver Abfälle**

### **2.2.1 Überblick über bereits erfolgte Benchmarking-Projekte**

Die in Abschnitt 2.1 angeführten Benchmarkings nach *Alonso et al. (2005)*, *Hampel et al. (2016)* und *Hudson & Jing (2013)* folgen dem unter dem vorstehenden Punkt (b2) skizzierten Weg. Bei den angesprochenen Benchmarkings nach (b2) geben die realen, aus den In-situ-Versuchen gewonnenen Messwertgraphen („Benchmarks“) den Maßstab vor, den die Simulationsergebnisse idealerweise erreichen sollten und zwar ohne insbesondere verdeckte Curve-fitting-Prozeduren. Simulatorkomponenten wie Stoffmodelle, mit denen vom Benchmark verstärkt abweichende Simulationsergebnisse erhalten werden, können identifiziert, umformuliert und unter dem Vorbehalt zutreffender Messdaten den messtechnisch ermittelten physikalischen Gegebenheiten angepasst werden. Gleichwohl ist bei den Resultaten aus Benchmarking-Projekten des öfteren zu beobachten, dass nicht nur rechnerisch ermittelte THM-Zustandsverläufe erheblich vom Benchmark abweichen, sondern auch, dass eine (teilweise sehr) breite Streuung in den über die Simulatoren ermittelten Verlaufskurven von Zustandsgrößen in Raum und Zeit untereinander besteht. Die folgenden Bilder 2.1 und 2.2 zeigen Resultate aus den jüngsten beiden abgeschlossenen DECOVALEX-Projekten (DECOVALEX-2011, *Garitte et al., 2013*, bzw. DECOVALEX-2015, *Graupner et al., 2015*), aus denen erhebliche Streubreiten in den Simulationsergebnissen ersehen werden können. Während die thermischen Prozesse relativ einfach abbild- und simulierbar sind (unkomplizierte Prozesse und Gleichungen, untergeordnete HM→T-Einflüsse) und auch kaum Unterschiede aufweisen, können signifikante Unterschiede in den Verläufen der Verschiebungen bzw. Verzerrungen und der Porenwasserdrücke bei den

Benchmarking-Teilnehmern beobachtet werden. Als ein weiteres Beispiel zeigt Bild 2.3 Ergebnisvergleiche von TM-Simulationen ohne hydraulische Einflüsse aus dem aktuell abgeschlossenen BMWi-Verbundvorhaben, *Hampel (2012)*. Auch hier kann bereits ersehen werden, dass insbesondere die Kurvenverläufe zu den mechanischen Zustandsgrößen stark variieren können. Es ergibt sich somit die Frage, inwieweit neben den modellierungsbedingten Unterschieden in den verwendeten Stoffmodellen auch ansatz- und/oder verfahrensbedingte, d.h. numerische Unterschiede in den verwendeten Simulatoren mitursächlich für die Streubreite bei derartigen Ergebnisvergleichen sind. Insbesondere für ein zu simulierendes Szenario, für das keine adäquaten Messwerte aus dem Labor oder Feld zur Orientierung vorliegen und für das dann eine

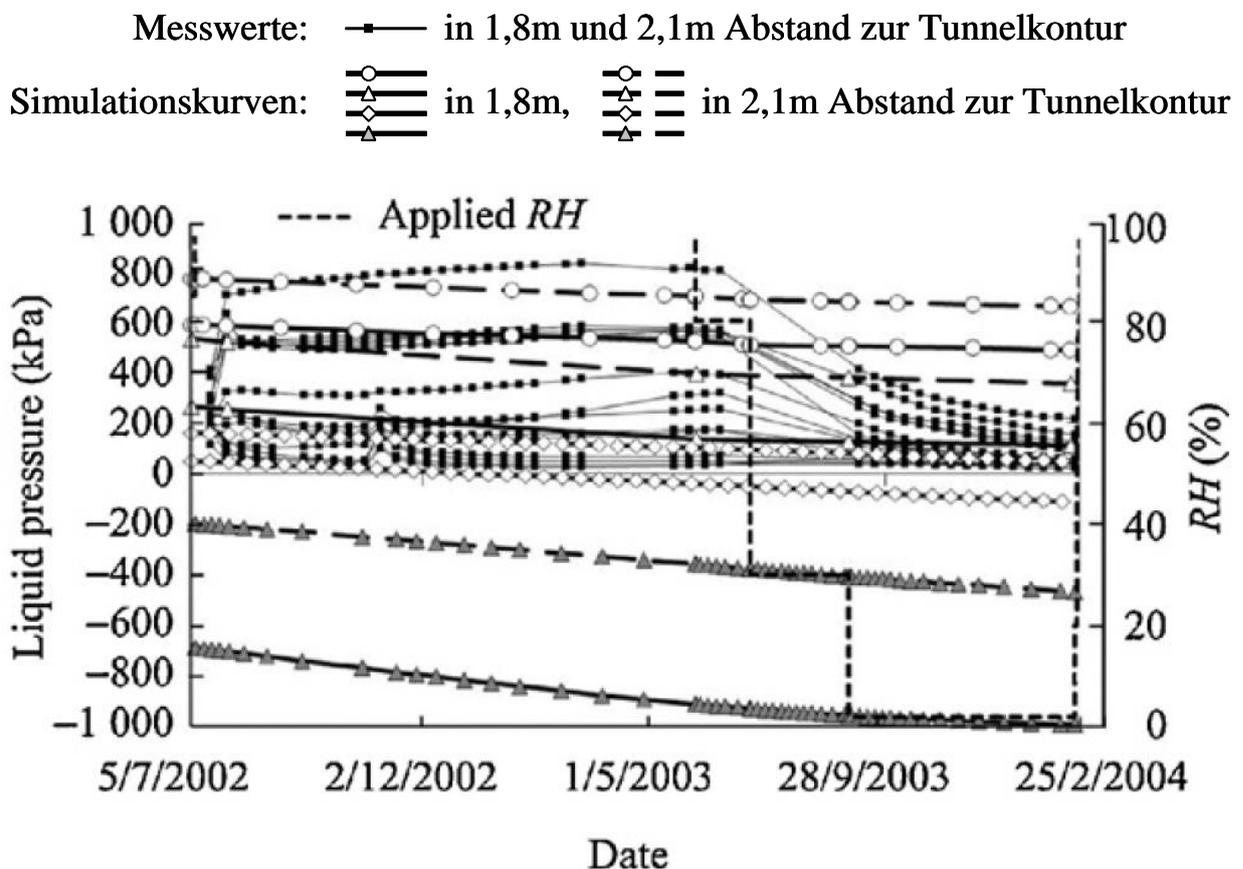
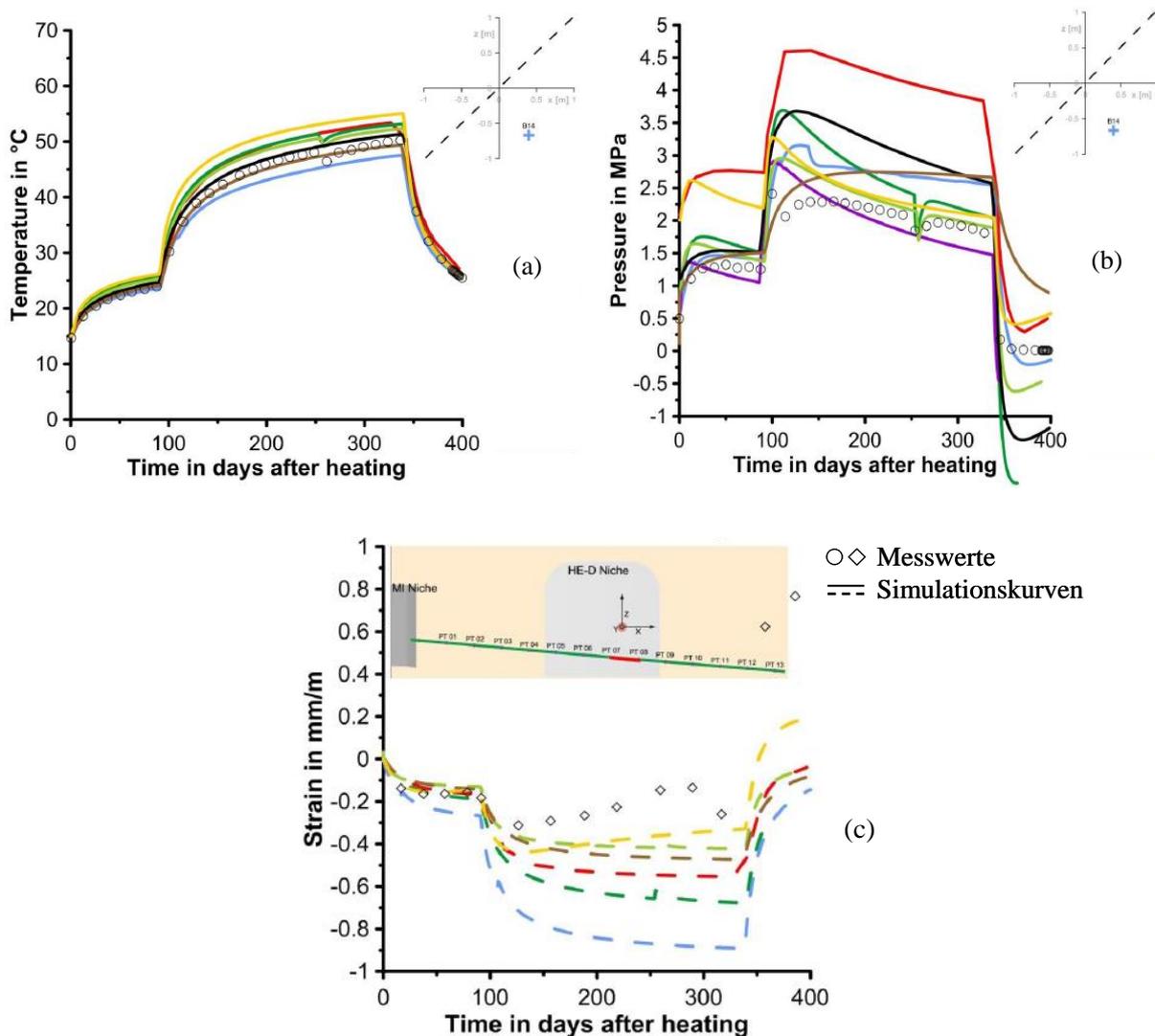
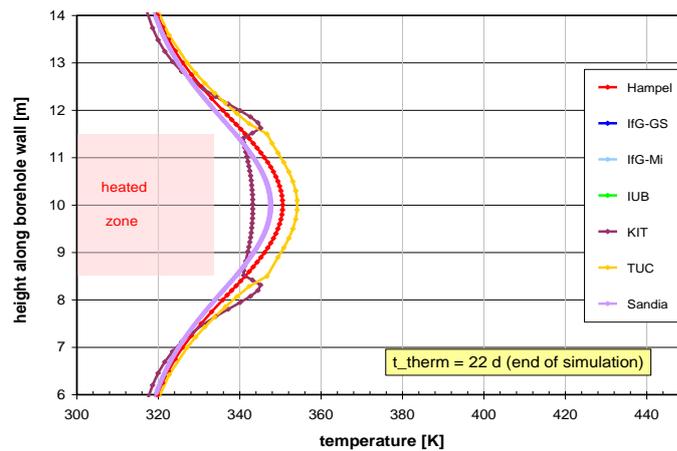


Bild 2.1: *Ventilation Experiment (VE) im UTL Mont Terri: Kontrollierte Bewetterung eines vom restlichen Bereich des Mikrotunnels hermetisch abgedichteten Tunnelbereiches mit variierenden Bewetterungsluftfeuchtigkeiten zur Bestimmung des Einflusses der Hohlraumluftfeuchtigkeit auf das Wirtsgestein – Piezometermesswerte der Porenwasserdrücke an unterschiedlichen Positionen in dem den abgedichteten Tunnelbereich umgebenden Gebirge (gesättigte Bereiche) und entsprechende Simulationsergebnisse im Rahmen des DECOVALEX-2011-Projekts, Garitte et al. (2013)*

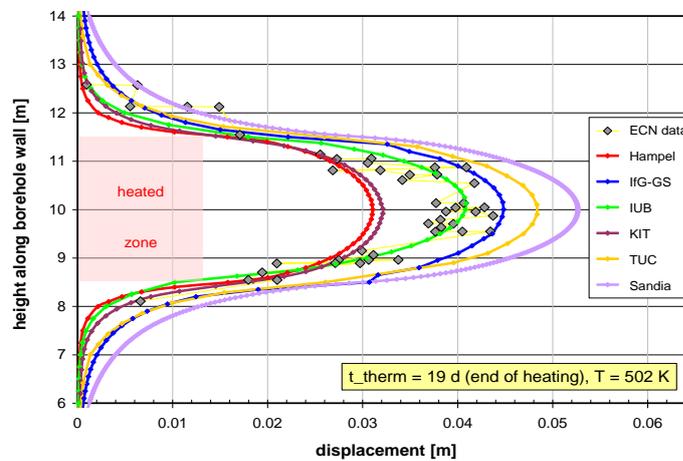
Bewertung von Simulationsergebnissen lediglich über eine Plausibilitätseinschätzung möglich ist – wie es beispielsweise bei den prädiktiven Simulationen zu einem Endlagerszenario für einen mehrere Jahrtausende umfassenden Prognosezeitraum der Fall sein wird – ist sicherzustellen, dass der Simulator numerisch korrekt arbeitet. Rechnerisch exakte Lösungen der die TH<sup>2</sup>M-gekoppelten Prozesse beschreibenden Differentialgleichungen liegen aufgrund der Komplexität zur Verifizierung der Berechnungsergebnisse nicht vor.



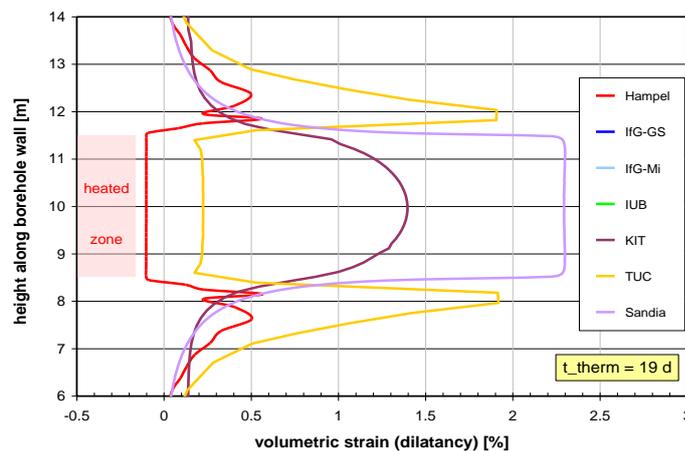
**Bild 2.2:** Heater Experiment (HE-D) im UTL Mont Terri: Unverfülltes horizontales Großbohrloch in Streichrichtung des Tonsteingebirges mit Anordnung von zwei elektrischen Erhitzern zur Bestimmung des Einflusses einer Wärmeentwicklung auf das Wirtsgestein – Messwerte eines (a) Temperatur- und eines (b) Porenwasserdrucksensors sowie (c) gemessene Verzerrungen eines Extensometers, jeweils mit entsprechenden Simulationsergebnissen im Rahmen des DECOVALEX-2015-Projekts, Graupner et al. (2015)



(a)



(b)



(c)

**Bild 2.3:** *HFCP-Experiment (Heated Free Convergence Probe) im UTL Asse II: Unverfülltes vertikales Großbohrloch mit Anordnung von drei elektrischen Erhitzern („heated zone“) zur Bestimmung des Einflusses einer Wärmeentwicklung auf das Wirtsgestein – Gegenüberstellung der Simulationsergebnisse der am BMWi-Verbundvorhaben beteiligten Organisationen für die Verteilungen von (a) Temperatur, (b) bohrlochwandnormaler Konvergenz (inkl. Messwerte) sowie (c) Volumenverzerrung (Dilatanz), Hampel (2012)*



Ein Simulatoren-Benchmarking (ohne Benchmark, also in einem erweiterten Wortsinn) mit zunächst einheitlichen generischen Referenzmodellen für alle Teilnehmer und dann ein Benchmarking anhand von ausgewählten Felduntersuchungen mit Messdaten als Benchmarks erscheint angesichts des qualitätssicherungsbezogen noch eher rudimentären Standes von Wissenschaft und Technik als ein zweckmäßiges und notwendiges Vorgehen zur Simulatorverifizierung und damit zur Qualitätssicherung und Bewertung der physikalischen und insbesondere rechnerischen Verlässlichkeit der Simulatoren (→ Transparenzsteigerung und Akzeptanzverbesserung). Eine umfassende Absicherung der am beantragten Vorhaben beteiligten Simulatoren und insbesondere der selbst (weiter-)entwickelten Codes ist im Bereich der Simulation endlagerrelevanter geotechnischer Prozesse in dieser Form bislang nicht erfolgt. Auch generell besteht bei der TUC als BenVaSim-Projektinitiator nur sehr geringe Kenntnis von einer derartigen Vorgehensweise im Rahmen anderer relevanter Projekte bei gleichzeitiger Berücksichtigung von mechanischen Prozessen und hydraulischer Zweiphasenströmung. Im Rahmen der aktuell bearbeiteten Phase des Benchmarkings „Task Force on Engineered Barrier Systems“ wird *Schäfers et al. (2017)* zufolge derzeit ein Simulatoren-Benchmarking durchgeführt, bei dem mechanische Prozesse und hydraulische Zweiphasenflussprozesse allerdings getrennt voneinander berücksichtigt werden. Bezüglich der Qualitätssicherung rechnerischer TH<sup>2</sup>M-Simulatoren im Endlagerbereich liegt nach Kenntnis der TUC also noch kein hinreichend breit abgesicherter Stand von Wissenschaft und Technik vor.

Hingegen lief bis vor wenigen Jahren mit Bezug zum Fachgebiet reaktiver Stofftransportprozesse im Rahmen der Endlagerung radioaktiver Abfälle das Benchmarking-Projekt „MoMaS“, bei dem die Charakteristika und Prozessgleichungen der physikalischen Modelle im Wesentlichen festgelegt gewesen sind und in dem der Fokus daher auf den unterschiedlichen eingesetzten Simulatoren gelegen hat. In einer frühen Phase ist auf diese Weise auch ein Benchmarking an mehreren hydromechanischen Modellbeispielen durchgeführt worden, *Chavant (2007)*. Im Gegensatz zu den Modellbeispielen des hier beantragten BenVaSim-Projekts sind jedoch in dem genannten Benchmark die für das Endlagersystemverhalten als signifikant erachteten Zweiphasenflussprozesse nicht berücksichtigt worden.

In den beiden folgenden Abschnitten werden Erfahrungen, die aus anderen Benchmarking-Projekten mit Blick auf das mit dem BenVaSim-Projekt geplante Simulatoren-Benchmarking abgeleitet werden können, anhand von mehreren Beispielen aus dem nach Kenntnis der TUC



langjährigsten aktiven Benchmarking-Projekt DECOVALEX und aus dem Simulatoren-Benchmarking MoMaS aufgezeigt.

### 2.2.2 Beispiel DECOVALEX

Das wohl bekannteste Benchmarking-Projekt im Forschungsbereich der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Gebirgsformationen ist das seit dem Jahr 1992 bestehende internationale Projekt DECOVALEX (Development of Coupled Models and their Validation against Experiments), bei dem mehrere Forschungsteams unterschiedliche Modellierungsaufgaben („Tasks“) mit ihren Simulatoren unter bis zu einem gewissen Grad vorgegebenen Rahmenbedingungen und mit Vorgaben für die Ergebnisauswertung bearbeiten. In etwa drei bis vier Jahre andauernden Phasen werden jeweils mehrere Modellierungsaufgaben zum gekoppelten thermischen, hydraulischen, mechanischen und/oder chemischen Verhalten von Endlagerkomponenten gestellt, die von den beteiligten Teams in einem individuell festgelegten Umfang bearbeitet werden. Die an den Phasen des DECOVALEX-Projekts beteiligten Teams werden dabei von unterschiedlichen Organisationen („Sponsoren“) gefördert, wobei sowohl Teams wie auch Sponsoren von Phase zu Phase wechseln können. Ein Lenkungsausschuss („Steering Committee“) bestehend aus Repräsentanten der in der jeweiligen Projektphase beteiligten Sponsoren übernimmt die wissenschaftliche Projektleitung. Die Königliche Technische Hochschule (KTH) in Stockholm, Schweden, stellt das Sekretariat für das Projekt, welches unter anderem die phasenbezogenen Abschlussberichte zusammenstellt.

Die sieben Phasen des DECOVALEX-Projekts, die bis dato realisiert worden sind, lauten wie folgt:

- DECOVALEX-I,                      Zeitraum: 1992-1995,    *Jing et al. (1996)*,
- DECOVALEX-II,                    Zeitraum: 1995-1999,    *Jing et al. (1999)*,
- DECOVALEX-III,                  Zeitraum: 1999-2003,    *Jing et al. (2005)*,
- DECOVALEX-THMC,                Zeitraum: 2003-2007,    *Jing et al. (2008)*,
- DECOVALEX-2011,                Zeitraum: 2008-2011,    *Hudson & Jing (2012)*,
- DECOVALEX-2015,                Zeitraum: 2012-2015,    *Jing et al. (2016)*,
- DECOVALEX-2019,                Zeitraum: 2016-2019,    Phase in Bearbeitung.



Die vorstehend genannten Jahreszahlen widersprechen sich mitunter in unterschiedlichen Quellen.

*Anmerkung zum Begriff „Phase“: In der ersten Phase des DECOVALEX-Projekts, DECOVALEX-I, wurden die jährlichen Meilensteine als „Phasen“ bezeichnet. Diese Bezeichnung, die z.B. noch in Literaturquellen wie Jing et al. (1996) verwendet worden ist, wird im vorliegenden Bericht allerdings an dieser Stelle wegen der Verwechslungsgefahr mit der seit DECOVALEX-III praktizierten Verwendung des Begriffs „Phase“ nicht übernommen.*

Die zentralen Modellierungsaufgaben in den DECOVALEX-Projektphasen basieren in der Regel auf Ergebnisgraphen aus laborativen Untersuchungen und Feldexperimenten oder auch auf Vorausberechnungen („blind predictions“) von geplanten Experimenten oder hypothetischen Szenarien mit oder ohne späterem Abgleich der Berechnungsergebnisse mit Messergebnissen. Zudem können im Vorfeld generische, zur Vereinfachung abstrahierte Modellbeispiele zur Überprüfung der grundsätzlichen Eignung der beteiligten Simulatoren für die dem generischen Modellbeispiel zugeordnete zentrale Modellierungsaufgabe zu bearbeiten sein. Üblicherweise besteht bei den Modellierungsaufgaben für die Teams mit Blick auf die unterschiedlichen spezifischen Eigenschaften ihrer Simulatoren eine gewisse Interpretationsspannbreite bei der Abbildung der Modellvorgaben mit der jeweiligen numerischen Umsetzung und dort insbesondere bei der Festlegung des detaillierten physikalischen Modells. Zur Demonstration des Einflusses von individuell unterschiedlichen numerischen Umsetzungen der physikalischen Vorgaben folgen drei ausgewählte Beispiele aus den DECOVALEX-Projektphasen.

#### *Beispiel 1: Modellierung geklüfteter Gebirgsbereiche in der Phase DECOVALEX-I*

Als erstes Beispiel für unterschiedliche Vorgehensweisen bei der modellhaften Umsetzung und der Bearbeitung einer Modellierungsaufgabe kann der Benchmarktest 1 (BMT1) aus der Phase DECOVALEX-I aus Jing et al. (1993) angeführt werden. Bei dem in Bild 2.4 dargestellten generischen Modellbeispiel des BMT1 handelt es sich um einen Vertikalschnitt in einem stark vereinfacht dargestellten großräumigen Gebirgsbereich, in dessen Zentrum sich ein durch einen rechteckigen Bereich repräsentiertes Endlager mit wärmeentwickelnden Abfällen befindet. Insbesondere in den ersten Phasen des DECOVALEX-Projekts lag der Fokus auf der THM(C)-Modellierung von Endlagerkomponenten und Gebirgsbereichen in geklüftetem Wirtsgestein

und somit im Wesentlichen auf der Analyse der durch das geogene Kluftnetzwerk gesteuerten HM(C)-Reaktion des Endlagernah- und -fernfelds auf anthropogene thermische Einflüsse (wärmeerzeugende Abfälle bzw. Erhitzer). Im Beispiel BMT1 werden die Kluftflächen als ein regelmäßiges quadratisches Netzwerk idealisiert, in dem die Abstände  $s$  zwischen den Kluftflächen im Rahmen von drei Variationssituationen unterschiedlich festgelegt werden. Für das hier wiedergegebene Beispiel ist der Abstand mit  $s = 100\text{m}$  angesetzt worden. Die Modellierung und die Simulation des Modellbeispiels durch die vier beteiligten Forschungsteams erfolgen TH<sup>1</sup>M-gekoppelt, wobei diese Prozesskopplung nicht zwingend vollständig in den unterschiedlichen Simulatoren realisiert ist und auch sequenzielle Prozess- und Simulatorkopplungen zur rechnerischen Lösung der Aufgabe angewendet werden. Das Endlager geht dabei lediglich unter einem thermischen Aspekt in Form einer Wärmeenergiequelle in das Berechnungsmodell ein, d.h. es wird kein Hohlraum aufgefahren und mit mechanischen und hydraulischen Randbedingungen versehen, und es wird auch kein Porenüberdruck durch korrosionsinduzierte hydraulische Quellen erzeugt. Mechanische Effekte sind in diesem Modell daher, wenngleich durch Änderungen der Temperaturen und sekundär auch der Porenwasserdrücke beeinflusst, lediglich in variierenden Öffnungsweiten der Kluftflächen und in temperaturbedingt variierenden, aber insgesamt aufgrund des fehlenden Hohlraumes eher gleichmäßigen Deformationen des gesamten Modells zu ersehen.

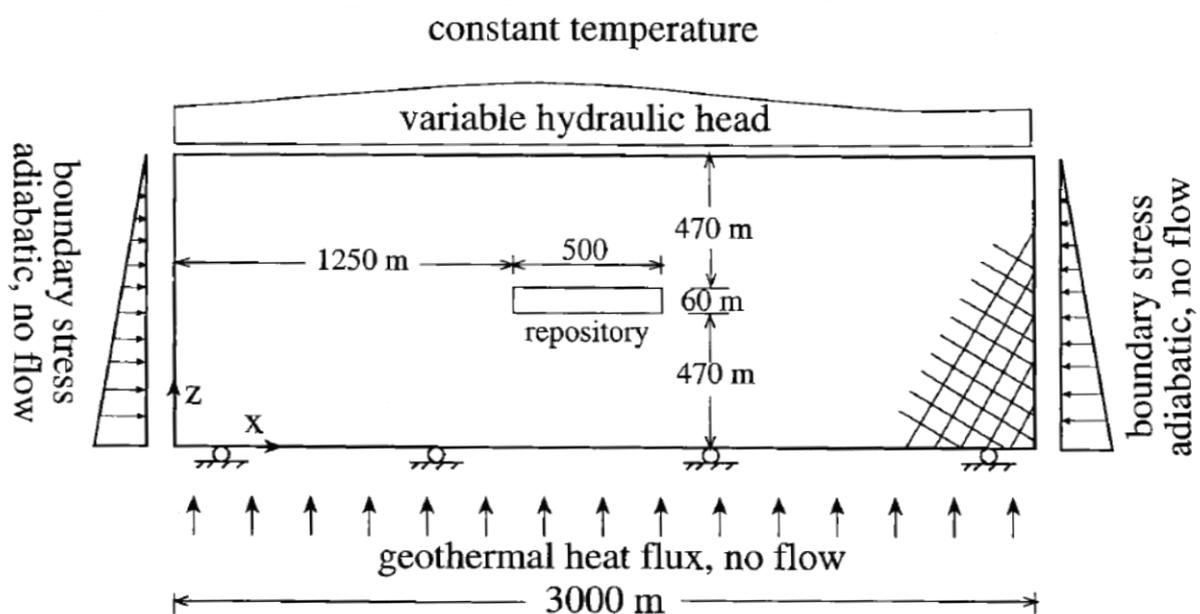
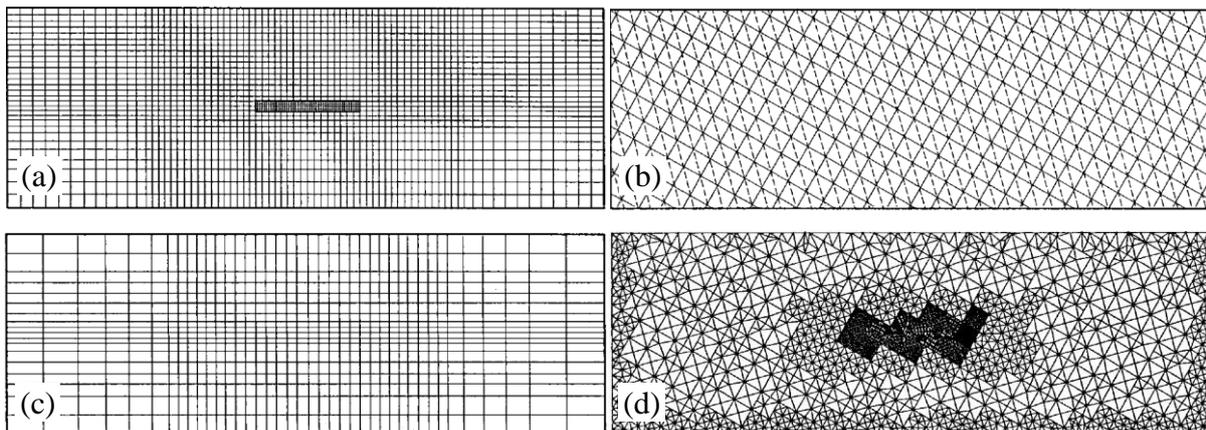


Bild 2.4: Abmessungen und Randbedingungen für das Modellbeispiel BMT1 aus der DE-COVALEX-Phase I, Jing et al. (1993)

Zum Einsatz gekommen sind für diese Modellierungsaufgabe unterschiedliche Arten von Simulatoren mit entsprechenden Diskretisierungen, die in Bild 2.5 wiedergegeben sind. Bei den Arten der Simulatoren handelt es sich um:

- eine Kopplung von zwei FEM-Simulatoren für TM- und H-Prozesse, für die vorliegende Aufgabe mit sequenzieller T/M→H-Kopplung (d.h. keine T↔M-Kopplung!), elastoplastischem Stoffmodell und verschmierter Berücksichtigung der Klüfte,
- eine Kopplung von drei FEM-Simulatoren für T-, M- und H-Prozesse mit sequenzieller T→HM-Kopplung (d.h. auch mit H↔M-Kopplung) und speziellen Kluftelementen,
- ein FEM-Simulator mit vollständiger THM-Kopplung, linear-elastischem Stoffmodell und verschmierter Berücksichtigung der Klüfte durch Risstensoren sowie
- ein DEM-Simulator mit FDM für Zeit- und blockbezogene Raumdiskretisierung mit T→M↔H-Kopplung (T→M-Kopplung für die distinkten Blöcke und H↔M-Kopplung für die Kluftflächen in jedem Zeitschritt).



*Bild 2.5: Diskretisierungen der vier beteiligten Forschungsteams für das Beispielmodell zur Berechnungsvariation mit  $s = 100m$  zum Benchmarktest BMT1 aus der DECOVALEX-Phase I, Jing et al. (1993) – (a) FEM-Modell mit Kluftberücksichtigung durch verschmierte Materialparameter und elastoplastische Deformationen (Team CEA/DMT), (b) FEM-Modell mit speziellen Kluftelementen (durchgezogene Linien im Modellinneren; Team ENSMP), (c) FEM-Modell mit verschmierter Kluftberücksichtigung durch Risstensoren (Team KPH), (d) DEM-Modell (Team INERIS)*

Bereits aus der vorstehenden Auflistung kann anhand der unterschiedlichen Eigenschaften der beteiligten Simulatoren und insbesondere anhand der unterschiedlichen modellhaften Umsetzungen des Klufnetzwerks ersehen werden, dass die Berechnungsergebnisse zur vorliegenden Modellierungsaufgabe BMT1 nicht nur von den unterschiedlichen numerischen Lösungsverfahren in den am Benchmarking beteiligten Simulatoren abhängen, sondern auch von den beiden Fragestellungen, welche für die Aufgabe relevanten Prozesse und Ansätze von den Simulatoren unterstützt werden *können* sowie – der vorstehenden Fragestellung untergeordnet – welche Ansätze und Materialparameter dann auch tatsächlich von den jeweiligen Teams für die Aufgabenbearbeitung ausgewählt *werden*. In diesem Beispiel sind elastoplastische Stoffmodelle mindestens in drei der mechanischen Simulatoren aus der vorstehenden Auflistung einsetzbar, werden aber lediglich im erstgenannten Simulator zur Schädigungsberechnung verwendet. Der häufig attestierte Einfluss unterschiedlicher Modelldiskretisierungen auf die Berechnungsergebnisse, der auch hier anhand von Bild 2.5 prognostiziert werden kann, geht dabei über alle drei vorstehend genannten modellierungs- und simulationstechnischen Einflussfaktoren – numerische Lösungsverfahren, vom Simulator unterstützte Prozesse und Ansätze, individuelle physikalische Modellierung und numerische Umsetzung – ein, da sie einerseits abhängig vom Lösungsverfahren des gewählten Simulators ist, andererseits aber auch im Rahmen der modellierungstechnischen Möglichkeiten des Simulators (z.B. manuelle oder automatische Diskretisierung) vom Benutzer parametrisiert werden kann.

In Bild 2.6 sind Berechnungsergebnisse der vier am BMT1 beteiligten Forschungsteams zu den zeitlichen Entwicklungen der Temperatur, der Druckhöhe  $h_l = p_l/\gamma_l$ , der Koordinatenspannungen und der Verschiebungen an einem Auswertungspunkt 220 m oberhalb des stilisierten Endlagerbereichs (Punkt Nr. 8) dargestellt. Hydraulische Prozesse sind vom Team INERIS zu dem Zeitpunkt des Benchmarkings, in dem die Berechnungen für den BMT1 durchgeführt worden sind, noch nicht berücksichtigt worden, und über die in Bild 2.6 ebenfalls fehlende Druckentwicklung im Modell des Teams ENSMP wird in *Jing et al. (1993)* ausgesagt, dass die Ergebnisse ähnlich denjenigen des Teams CEA/DMT sind. Somit können die insgesamt augenfälligsten Abweichungen in den Berechnungsergebnissen beim Team KPH festgestellt werden, und dieser Umstand wird in der genannten Literaturquelle speziellen Ansätzen des Teams zugeschrieben:

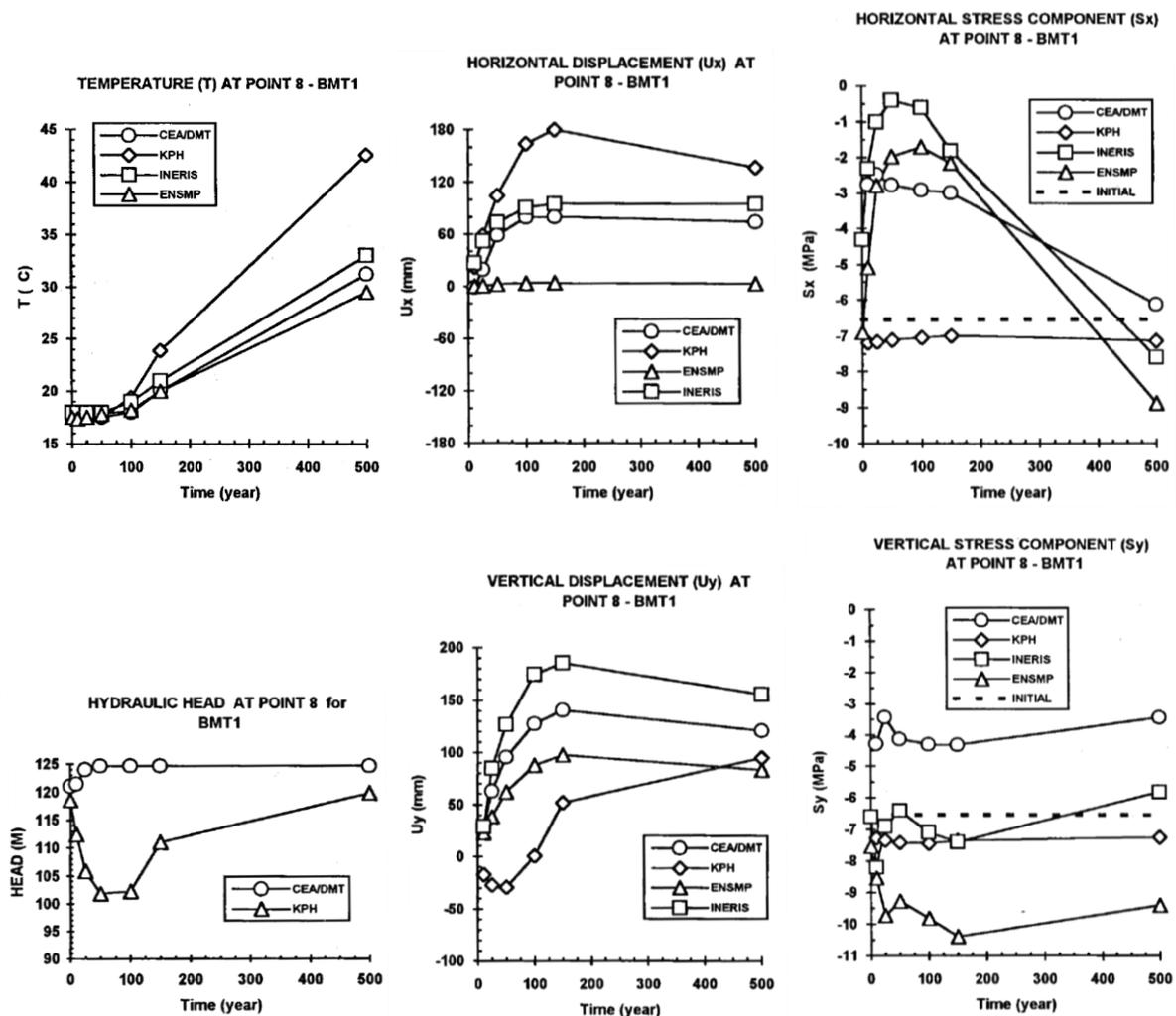


Bild 2.6: Berechnungsergebnisse der vier Forschungsteams CEA/DMT, KPH, INERIS und ENSMP für die zeitabhängige Entwicklung der Temperatur (oben links), der Druckhöhe (unten links), der Deformationen (Mitte) und der Koordinatenspannungen (rechts) oberhalb des Endlagers für die Berechnungsvariation mit  $s = 100\text{m}$  im Rahmen des Benchmarktests BMT1, Jing et al. (1993)

- eine veränderliche spezifische Wärmekapazität des Gebirges erlaubt einen erhöhten Temperaturanstieg,
- die Ursache für die Porendruckabsenkung wird in dem verwendeten Risstensoransatz vermutet (Beschreibung der porendruckinduzierten Verzerrung über einen Risstensor) und
- die eher weniger stark ausgeprägten Spannungsänderungen werden mit dem konvektionsgesteuerten Abtransport von Wärmeenergie durch das Porenwasser und einer damit einhergehenden verminderten thermischen Expansion des Gebirgsmaterials bzw. einem verminderten Spannungsaufbau erklärt.



In den Graphen der drei anderen Teams erscheint das qualitative THM-Verhalten des Wirtsgesteins im Endlagerfernfeld zwar vergleichbar, dennoch können auch hier insbesondere in den Resultaten zum mechanischen Verhalten des modellierten Gebirgsbereichs signifikante Diskrepanzen in den Größenordnungen der Zahlenwerte festgestellt werden. Es ist davon auszugehen, dass auch die Diskrepanzen in den Größenordnungen nicht lediglich durch unterschiedliche numerische Lösungsverfahren für dasselbe physikalische Modell, sondern bereits durch unterschiedliche Modellierungsansätze entstanden sind.

Auch die Resultate zu den im weiteren zeitlichen Verlauf der DECOVALEX-I-Phase bearbeiteten Testfällen („Test Cases“) TC1, TC1:2 (TC1 mit überarbeiteten Vorgaben), TC2 und TC3 zeigen, dass unterschiedlich angesetzte Stoffmodelle, Randbedingungen, Diskretisierungen und Zahlenwerte in Parametern und Abmessungen in Verbindung mit den unterschiedlichen Arten der eingesetzten Simulatoren in einem wesentlichen Umfang mitursächlich für die Diskrepanzen in den dort erhaltenen Berechnungsergebnissen zueinander sind, *Jing et al. (1996, 1993, 1994, 1995)*. Numerische Einflussfaktoren können in den Ergebnissen zu diesen Modellbeispielen nicht klar von modellierungsbedingten Einflussfaktoren abgegrenzt werden, so dass eine (unterstellte und ggf. durch nicht im Zusammenhang mit dem Benchmarking stehende Untersuchungen unterfütterte) korrekte Funktionsweise der eingesetzten Simulatoren nicht generell durch dieses Benchmarking belegt wird.

#### *Beispiel 2: Modellierung des HM-Verhaltens von Tonstein in der Phase DECOVALEX-THMC*

In der vierten Phase des DECOVALEX-Projekts ist mit dem verfestigten Toarcium-Tonstein der französischen Endlagerforschungslokation Tournemire erstmals ein nicht geklüftetes Wirtsgestein als Benchmark verwendet worden. Im Rahmen des Tasks C sind unter anderem

- der während der Streckenauffahrung und dann über einen mehrjährigen Nachlaufzeitraum durch begleitende Messungen dokumentierte Einfluss des neuaufgefahrenen Querstollens 2003 auf das HM-Verhalten des umgebenden Gebirges (Mine-by-Test) sowie
- die Ausbreitung von Teilsättigungszonen um die drei zum Zeitpunkt der Projektphase DECOVALEX-THMC im Untertagelabor (UTL) Tournemire bestehenden Strecken – den zentral verlaufenden ehemaligen Eisenbahntunnel 1881 sowie den beiden Querstollen 1996 und 2003 –



untersucht worden, *Rejeb et al. (2008)*. Bei beiden Experimenten ist ein besonderes Augenmerk auf das sich über einen mehrjährigen Zeitraum entwickelnde HM-Verhalten gelegt worden, das durch die im UTL Tournemire auftretenden saisonalen Schwankungen der relativen Luftfeuchtigkeit induziert wird und sich über entsättigungsbedingte Schrumpfungsrisse an den unverbauten Gebirgskonturen in den trockeneren Wintermonaten und Resättigungen in den feuchteren Sommermonaten bemerkbar macht.

Im Gegensatz zu den in den vorangegangenen DECOVALEX-Phasen gestellten Modellierungsaufgaben sind die Rahmenbedingungen für Task C der Projektphase DECOVALEX-THMC näher präzisiert worden, beispielsweise durch die Vorgabe eines konstanten Gasphasendrucks, durch die Vorgabe des Ansatzes nach (*Mualem/van Genuchten*) für Kapillardruck und Relativpermeabilität der Flüssigphase oder hinsichtlich mechanischer Stoffmodelle durch die Einschränkung auf elastische und quellungs-/schrumpfunginduzierte Deformationsprozesse. Durch die Präzisierung der Vorgaben konnte somit auf eine gewisse Weise eine Homogenisierung der physikalischen Modelle der drei beteiligten Forschungsteams und im übertragenen Sinn dann auch ihrer Simulatoren erzielt werden („the three research teams’ codes can be considered as fundamentally similar“, *Rejeb et al., 2008*). Nach wie vor bestehen jedoch auch Unterschiede beispielsweise in speziellen implementierten Gleichungen z.B. für die Effektivspannungen in teilgesättigten Bereichen oder für das Quellungs- und Schrumpfungsverhalten, und es sind zur Bearbeitung der Modellierungsaufgaben auch unterschiedliche Berechnungsmodelle (z.B. 2D/3D) und Diskretisierungen von den Teams erstellt worden.

Die instrumentierten Bohrlöcher für das Experiment zur Untersuchung des Einflusses einer neu aufzufahrenden Strecke, dem Querstollen 2003, auf das umgebende Gebirgsnahfeld sind in Bild 2.7 zusammen mit zwei im Vorfeld abgeteuften Erkundungsbohrlöchern EX2 und EX3, die für das eigentliche Experiment irrelevant sind, abgebildet. Die in grüner Farbe dargestellten Bohrlöcher M4 und M5 sind mit elektrischen Extensometern mit drei bzw. fünf Stangen ausgestattet worden, während drei Porendrucksensoren im in blauer Farbe dargestellten Bohrloch PH2 installiert worden sind. Die Abstände der in den Bohrlöchern M4, M5 und PH2 errichteten Verankerungs- bzw. Messpunkte zur Kontur des aufzufahrenden Querstollens 2003 betragen bis zu 10m. Die lilafarbig dargestellten Bohrlöcher MS1 bis MS4 enthalten Sensoren zur Erfassung mikroseismischer Wellen und werden im Rahmen dieses DECOVALEX-Tasks nicht berücksichtigt. Für die numerischen Simulationen standen den am Task C teilnehmenden Forschungsteams zunächst neben den geometrischen Abmessungen lediglich laborativ und in situ

ermittelte Materialparameter für eine Vorausberechnung des HM-Gebirgsverhaltens im Nahfeld des Querstollens 2003 zur Verfügung, bevor den Teams die Möglichkeit zur Kalibrierung ihrer physikalischen Modelle anhand der Messergebnisse des Experiments gegeben worden ist.

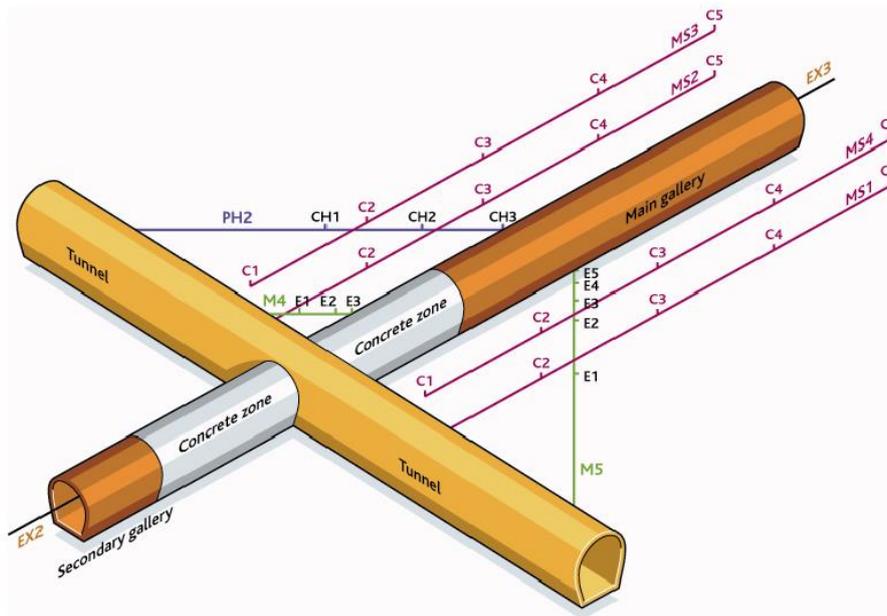


Bild 2.7: Instrumentierungsbohrlöcher für die zeitabhängigen Messungen der Deformationen (M3 und M4) und der Porenwasserdrücke (PH2) während der Auffahrung des Querstollens 2003 („main gallery“) in der Lokation Tournemire, Rejeb et al. (2008)

In Bild 2.8 sind exemplarisch die Messergebnisse für die Extensometerdeformationen an den Verankerungspunkten M5-1 bis M5-5 – mit Abständen von 1m, 2m, 3,5m, 5m bzw. 10m zur Kontur des Querstollens 2003 – für einen Zeitraum von fast drei Jahren in Verbindung mit den entsprechenden Simulationsergebnissen der drei am Task C beteiligten Forschungsteams zusammengestellt, Rejeb et al. (2008) (Zusammenstellung der Diagramme aus Lux et al., 2012). Aus der linken Spalte in Bild 2.8 kann wie bereits im vorangehenden Beispiel entnommen werden, dass unterschiedliche Herangehensweisen der beteiligten Teams zu deutlich erkennbaren Diskrepanzen zwischen den berechneten Graphen führen können, die sich auch insbesondere im Rahmen einer mittel- bis langfristigen zeitlichen Entwicklung noch weiter verstärken können. Selbst die für den Task C vorgenommene Vorgabenpräzisierung hat nicht zu einer qualitativ hinreichenden Übereinstimmung der unterschiedlichen Ergebnisgraphen geführt, da nach wie vor sehr unterschiedliche Berechnungsmodelle von den Teams eingesetzt worden sind und auch die saisonalen Luftfeuchtigkeitsschwankungen nicht von allen Teams für ihre Simulatio-

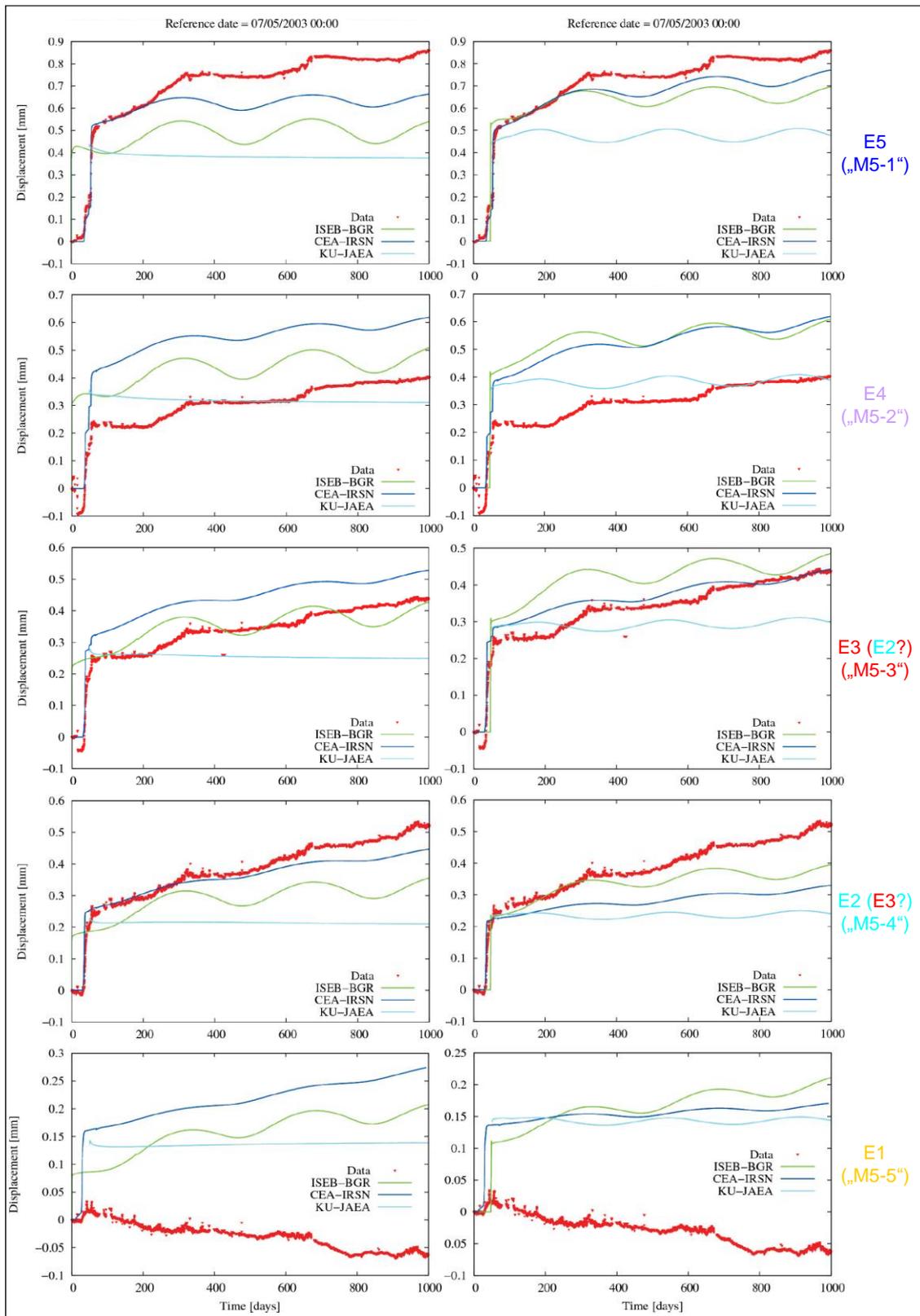
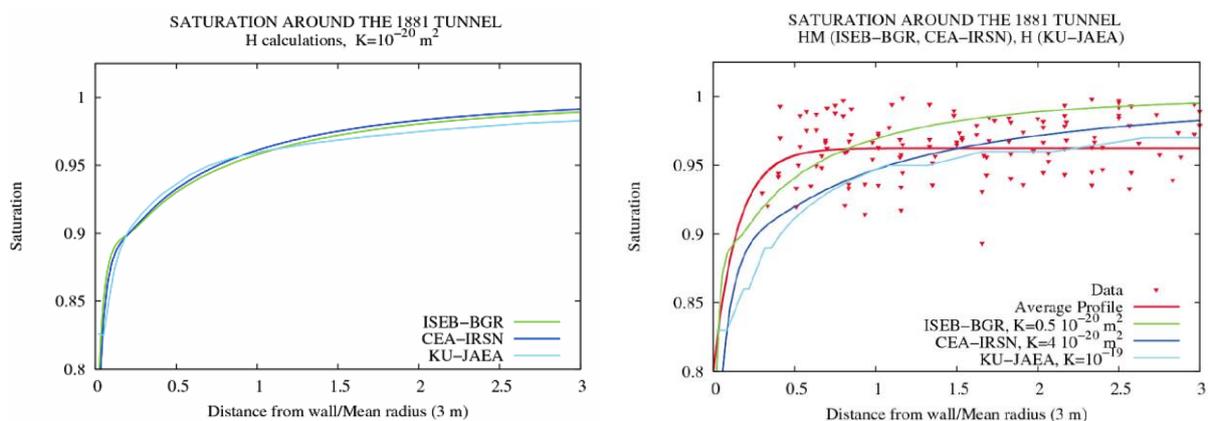


Bild 2.8: Vergleich von Simulations- und Messergebnissen zum Mine-by-Test im URL Tour-nemire im Rahmen des Tasks C der Projektphase DECOVALEX-THMC: unter Verwendung vorgegebener Materialparameter (linke Spalte) und nach Modellkalibrierung (rechte Spalte), Rejeb et al. (2008), Zusammenstellung aus Lux et al. (2012)

nen in Betracht gezogen worden sind. Die Parameterkalibrierung, deren zugehörige Simulationsergebnisse im Bild 2.8 in der rechten Spalte dargestellt sind, hat eine verbesserte Approximation der Berechnungsergebnisse an die Messwertgraphen und damit einhergehend idealerweise eine Approximation der Simulationsergebnisse aneinander zum Ziel gehabt. Mit Blick auf das im BenVaSim-Projekt beabsichtigte Simulatoren-Benchmarking widerspricht diese Vorgehensweise zum einen jedoch dem Ziel einer Verifizierung unterschiedlicher Simulatoren, und zum anderen konnten im vorliegenden Beispiel auch weitestgehend keine signifikanten Verbesserungen in der Simulation des HM-gekoppelten Streckeneinflusses auf das umliegende Gebirge erzielt werden.

Der Simulation der Entsättigung in den den Tunnel und die Querstollen umgebenden Gebirgsbereichen ist ein Simulatorenvergleich zu den ablaufenden hydraulischen Prozessen vorausgegangen, bei dem unter weiteren Vereinfachungen der Modellvorgaben und damit weiteren Homogenisierungen der physikalischen Modelle der unterschiedlichen Teams die Simulationsergebnisse vergleichend gegenübergestellt worden sind. Ein Vergleich unter derart vereinfachten Modellvorgaben kommt – mit Blick auf das BenVaSim-Projekt – einem Simulatoren-Benchmarking bereits sehr nah. Bei den auf den Simulatorenvergleich aufbauenden Simulationen der Streckennahfeldentsättigung sind den bearbeitenden Teams allerdings wieder in einem gewissen, wenngleich beschränkten Rahmen Parameterkalibrierungen und Modellierungsfreiheiten gestattet worden. Bild 2.9 zeigt die Resultate der drei Teams für die Sättigungsgrade im Stre-



**Bild 2.9:** Berechnungsergebnisse für die Sättigung im Streckennahfeld des Tunnels 1881 des UTL Tournemire unter vereinfachten Modellierungsvorgaben (links) sowie unter den ursprünglich vorgesehenen Modellierungsvorgaben und mit Parameterkalibrierung anhand der Messergebnisse (rechts) im Rahmen des Tasks C der Phase DECOVALEX-THMC, Rejeb et al. (2008)



ckennahfeld am Beispiel des Tunnels 1881 unter den vereinfachten und den normalen Modellvorgaben, und es kann im linken Diagramm deutlich gesehen werden, dass beim Simulatorenvergleich noch eine sehr gute Übereinstimmung der Resultate von den Teams erzielt werden konnte. Die verbleibenden Diskrepanzen in dem Diagramm werden dabei auf numerische Einflüsse und vor dem Hintergrund des über 100-jährigen simulierten Zeitraums insbesondere auf Einflüsse der Wahl und/oder der programmseitigen Steuerung der Zeitschrittweiten zurückgeführt. Die den Teams gestatteten Wahlfreiheiten führen dann jedoch gemäß dem rechten Diagramm von Bild 2.9 wieder dazu, dass die Berechnungsergebnisse der drei Teams verstärkt voneinander abweichen.

Für die Idee eines Simulatoren-Benchmarkings liefern die vorstehend beschriebenen Resultate somit einen ersten Hinweis darauf, dass der Einfluss der numerischen Faktoren dem Einfluss der Herangehensweise an eine Modellierungs- und Simulationsaufgabe durchaus weit untergeordnet sein kann, wie es generell als wünschenswert angesehen werden kann. Es stellen sich aber mit Blick auf das BenVaSim-Projekt dennoch die Fragen, ob diese Gewichtung der Einflussfaktoren auch noch für TH<sup>2</sup>M-gekoppelte Prozesse zutrifft und ob sie auf die im BenVaSim-Projekt einzusetzen beabsichtigten Simulatoren übertragen werden kann.

### *Beispiel 3: Modellierung einer Einlagerungsstrecke in der Phase DECOVALEX-THMC*

Abschließend wird kurz auf eine Vorfeldaufgabe zu einer weiteren Modellierungsaufgabe aus der Projektphase DECOVALEX-THMC eingegangen, bei der unter anderem das THM-Gebirgsverhalten von stark geklüftetem Schmelztuffstein der US-amerikanischen Lokation Yucca Mountain in der Umgebung einer unverfüllten Einlagerungsstrecke von vier Forschungsteams mit fünf unterschiedlichen Simulatoren numerisch analysiert worden ist, *Birkholzer et al. (2008)*. Das für die Bearbeitung der Modellierungsaufgabe mit der Bezeichnung D\_THM2 sowie der zugehörigen Vorfeldaufgabe („model inception“) vorgegebene geometrische 2D-Modell ist zusammen mit seinen Abmessungen und mit Auswertungspunkten in Bild 2.10 dargestellt.

Im Vordergrund stehen bei der Modellierungsaufgabe D\_THM2 die Wechselwirkungen zwischen den Prozessen in der kausalen Reihenfolge  $T \rightarrow M \rightarrow H$ , wengleich auch  $H \rightarrow M$ - (z.B. Effektivspannungskonzept nach *Terzaghi*),  $H \rightarrow T$ - (z.B. Wärmekonvektion und Wasserdampfdiffusion) und  $T \rightarrow H$ -Prozesskopplungen in die Modellierung der beteiligten Teams eingegan-

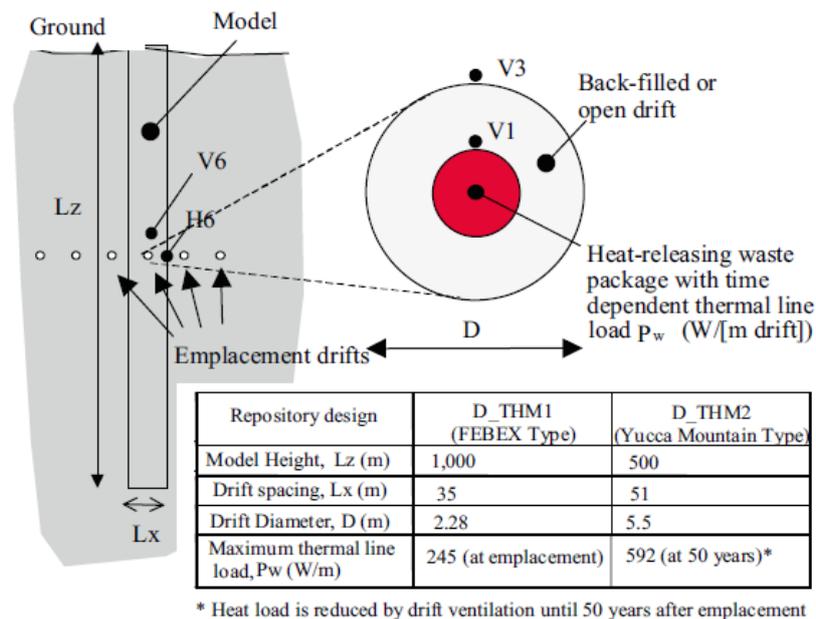


Bild 2.10: Modellgeometrie und Auswertungspunkte für die Modellbeispiele D\_THM1 und D\_THM2 des Tasks D der Phase DECOVALEX-THMC, Birkholzer et al. (2008)

gen sind. Die Temperatur als treibende Kraft für die Gebirgsreaktion auf das Endlager wird dabei für den Zeitraum der ersten 50 Jahre nach Einlagerung durch eine Bewetterung der Einlagerungsstrecke niedrig gehalten. Des Weiteren wird der M→H-Einfluss, der in der eigentlichen Modellierungsaufgabe z.B. über durch variierende Kluftöffnungsweiten induzierte Permeabilitätsänderungen eingehen kann, für die hier betrachtete Vorfeldaufgabe zunächst nicht berücksichtigt, d.h. es bestehen dort nur noch die Prozesskopplungen  $(T \leftrightarrow H) \rightarrow M$ . Die Teams haben sich bei ihren Herangehensweisen an die Vorfeldaufgabe auf im Grundsatz äquivalente thermische und mechanische Prozess- bzw. Stoffmodelle (*Fourier* bzw. *Hooke*) sowie eine äquivalente  $T \rightarrow M$ -Prozesskopplung festgelegt. Zudem sind bei allen Teams ausschließlich Kontinuumsmodelle zur Bearbeitung von D\_THM2 und der zugehörigen Vorfeldaufgabe zum Einsatz gekommen. Unterschiede in der Modellierung der Vorfeldaufgabe bestanden somit im Wesentlichen bei den gewählten Ansätzen für hydraulische Prozesse und für die entsprechenden Kopplungen, wie z.B. dem Ansatz eines dualen Kontinuums, dem Ansatz von Ein- oder Zweiphasenflussprozessen oder Ansätzen für Verdampfungseffekte und Dampfdiffusionsprozesse aufgrund eines zerfallswärmeinduzierten Anstiegs der Temperaturen in der Einlagerungsstrecke auf mindestens 100°C.

Die Diagramme im Bild 2.11 zeigen, dass im Hinblick auf die Vorfeldaufgabe mit den unterschiedlichen Simulatoren nicht nur für die Temperaturentwicklung, sondern auch für die Ent-

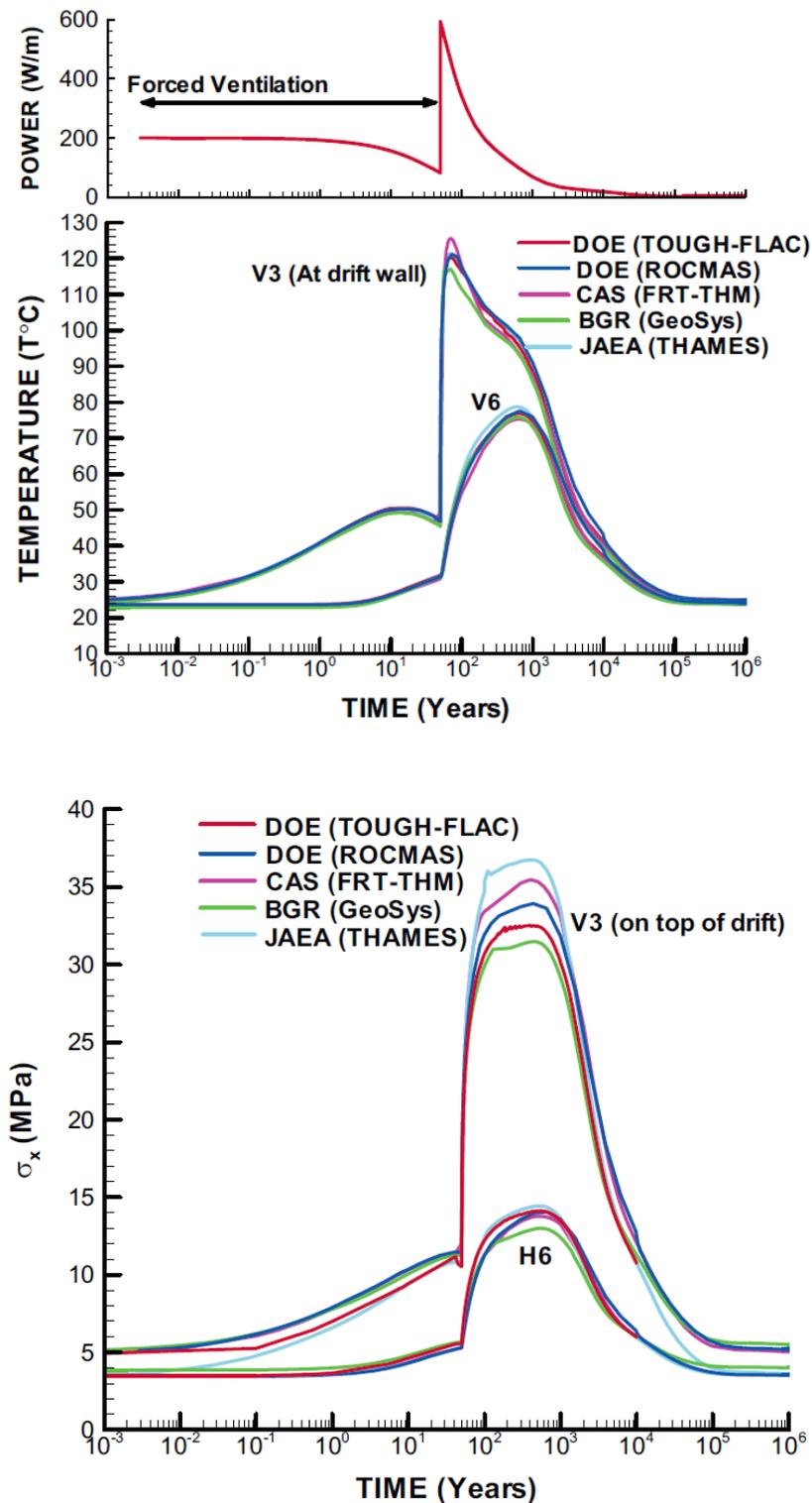


Bild 2.11: Berechnungsergebnisse für die Temperatur und für die Horizontalspannung in der Firste der Einlagerungskammer (Punkt V3) sowie in etwa 50m vertikaler (V6) bzw. horizontaler (H6) Entfernung vom Kammernmittelpunkt im Tuffsteingebirge des UTL Yucca Mountain im Rahmen des Tasks D der Phase DECOVALEX-THMC, Birkholzer et al. (2008)

wicklung der Spannungen (hier: der Horizontalspannung) Berechnungsergebnisse in guter Übereinstimmung erhalten worden sind. Der Einfluss der Temperaturentwicklung auf den Spannungsaufbau konnte offensichtlich von allen Simulatoren in gleicher Weise berechnet werden, und der Unterschied in den Ergebnisgraphen wird in *Birkholzer et al. (2008)* daher auf voneinander abweichende Diskretisierungen und unterschiedliche Zuordnungen der vorgegebenen Auswertungspunkte zu Punkten in der jeweiligen Modelldiskretisierung zurückgeführt. Ein H→M-Einfluss scheint bei dieser Vorfeldberechnung zum Modellbeispiel D\_THM2 trotz der Unterschiede bei den Teams in der Modellierung der hydraulischen Prozesse, die anhand von Bild 2.12 sichtbar werden, von geringer Bedeutung zu sein.

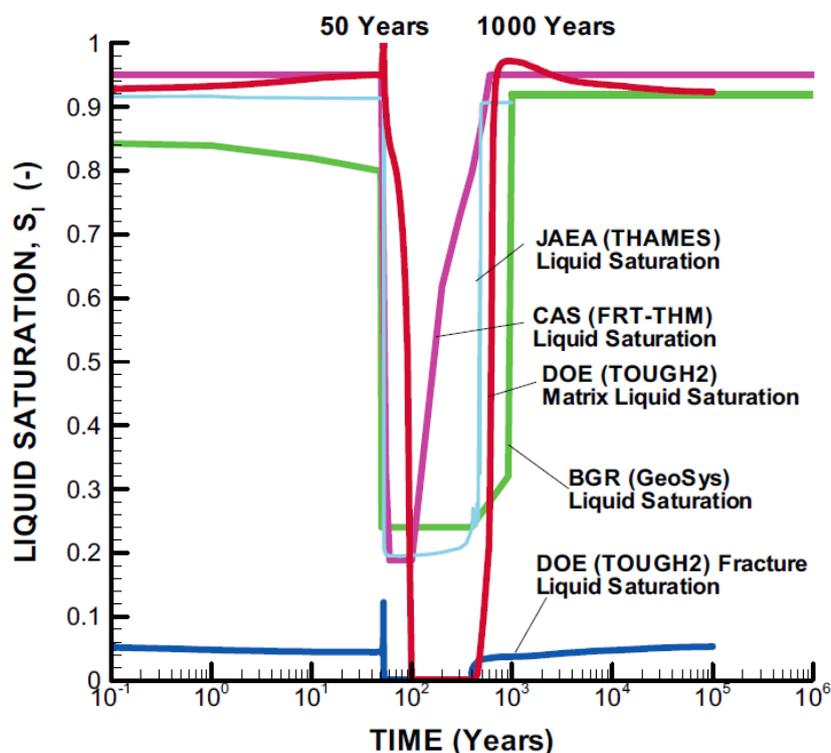


Bild 2.12: Berechnungsergebnisse für die Sättigung in der Firste der Einlagerungskammer (Punkt V3) bzw. im Fall des Ansatzes eines dualen Kontinuums vom Team DOE für die differenzierten Sättigungen für Gesteinsmatrix und Klüfte im Rahmen des Tasks D der Phase DECOVALEX-THMC, *Birkholzer et al. (2008)*

### 2.2.3 Beispiel MoMaS

Das in den Jahren von 2001 bis 2014 bearbeitete Benchmarking-Projekt „MoMaS“ (Modélisations mathématiques et simulations numériques liées aux problèmes de gestion des déchets nucléaires) bot Verifizierungsmöglichkeiten für Simulatoren zum reaktiven Stofftransport (HC-

oder THC-Prozesse) im Rahmen der Endlagerung radioaktiver Abfälle. Im Gegensatz zu den anderen in diesem Bericht angeführten Benchmarkings ist bei MoMaS der Interpretationsfreiheit in der physikalischen Modellierung bewusst gering gehalten worden und hat sich primär auf die numerische Umsetzung der gegebenen physikalischen Modelle beschränkt.

Als Beispiel kann hier eines der vereinfachten fiktiven und eher abstrakten, aber als „repräsentativ für in der Endlagersimulation zu findende Aufgabenstellungen“ bezeichneten Modellbeispiele aus *Carrayrou et al. (2010a)* aufgeführt werden. Bild 2.13 zeigt die Modellgeometrie des 1D-Beispiels, bei dem am linksseitigen Rand Wasser mit chemisch reaktiven Komponenten in fixierten Konzentrationen in das Modell strömt und am rechtsseitigen Rand wieder aus dem Modell austreten kann. Unterschiedliche Permeabilitäten und reaktive Eigenschaften der beiden im Modell auftretenden Materialien beeinflussen dabei die räumlichen und zeitlichen Konzentrationsverteilungen der reaktiven Komponenten.

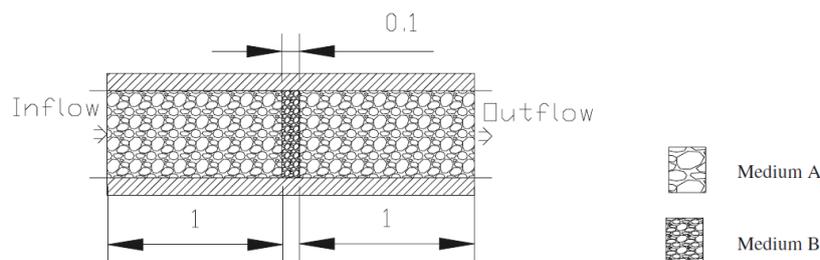


Bild 2.13: Geometrie für das eindimensionale Modell zum reaktiven Stofftransport aus dem Benchmarking-Projekt MoMaS, *Carrayrou et al. (2010a)*

In Bild 2.14 sind Berechnungsergebnisse der unterschiedlichen am Simulatoren-Benchmarking teilnehmenden Forschungsteams für die Konzentration einer festen Komponente zu einem ausgewählten Zeitpunkt dargestellt, *Carrayrou et al. (2010b)*. Aus dem Bild kann ersehen werden, dass die Diskrepanzen in den Graphen sehr geringfügig sind im Vergleich mit den in den vorangehenden Abschnitten gezeigten Gegenüberstellungen von Simulationsergebnissen. Die gewählte Vorgehensweise bei einem Simulatoren-Benchmarking mit möglichst geringen physikalischen und konfigurativen Freiheitsgraden erscheint daher ideal für die Verifizierung unterschiedlicher Simulatoren geeignet, wenngleich auch hierbei stets mit (zumindest) lokalen Diskrepanzen in den Ergebnisgraphen zu rechnen ist, wie aus dem rechten Diagramm von Bild 2.14 ersehen werden kann.

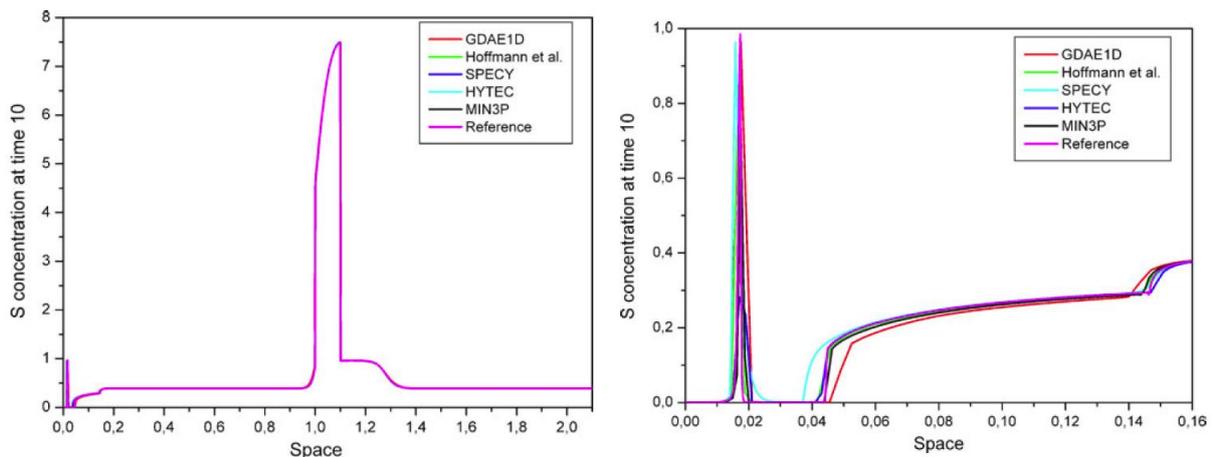


Bild 2.14: Berechnungsergebnisse für die Konzentration einer Feststoffkomponente („S“) im gesamten Modell (links) bzw. in der Nähe des linksseitigen Modellrandes (rechts) für das eindimensionale Modell im Rahmen des Benchmarking-Projekt MoMaS, Carrayrou et al. (2010b)

#### 2.2.4 Schlussfolgerungen aus den Benchmarking-Erfahrungen und Konsequenzen für das BenVaSim-Projekt

Aus den in den vorangehenden Abschnitten vorgestellten Ergebnissen zu exemplarisch ausgewählten unterschiedlichen Modellbeispielen aus den Projekten DECOVALEX und MoMaS kann abgeleitet werden, dass die durchgeführten Benchmarkings aus dem erstgenannten Projekt im Grundsatz dazu geeignet sind, die unterschiedlichen modellierungstechnischen Herangehensweisen sowie die physikalischen und numerischen Ansätze, mit denen Forschungseinrichtungen und -unternehmen Aufgabenstellungen zur Beantwortung von Integritäts-, Stabilitäts- und Risikobewertungsfragen im Rahmen von Planung/Design/Kontrolle von Endlagersystemkomponenten oder im Rahmen von Langzeitsicherheitsanalysen zu einem Endlagerkonzept bearbeiten, mit Blick auf die Eignung dieser Ansätze und damit auf die Zuverlässigkeit dieser Herangehensweisen bewertbar zu machen. Bei der praktizierten Vorgehensweise bleibt dort aber generell die Frage nach der numerischen Qualität der Simulatoren offen, da bei der Bearbeitung der Modellierungsaufgaben implizit bereits davon ausgegangen wird, dass die eingesetzten Simulatoren korrekt arbeiten. Einerseits kann bei geringfügigen Unterschieden in den in den Simulatoren implementierten physikalischen Ansätzen und Gleichungen die Größenordnung der Ergebnisdiskrepanzen vergleichbar sein mit der Größenordnung von in der Numerik begründeten Ergebnisdiskrepanzen, wie ein Vergleich der Bilder 2.9 links und 2.11 veranschaulicht, so dass die mit diesen Ansätzen und Gleichungen verbundenen Herangehensweisen als



äquivalent bewertet werden können. Andererseits können Auswirkungen aus dem modellierungstechnischen Bearbeitungsansatz und Auswirkungen aus seiner numerischen Umsetzung durch die dort präsentierte Art von Benchmarkings nicht klar voneinander abgegrenzt werden. In der Folge verbleiben bei Betrachtung von Bild 2.6 oder Bild 2.8 Fragen wie etwa „Welche Anteile der in den Bildern erkennbaren Diskrepanzen beruhen auf dem Einsatz von die Diskontinuitäten berücksichtigenden DEM- oder DFN-Simulatoren anstatt von kontinuumsmechanischen FEM- und FDM-Simulatoren?“ oder auch „Wie groß sind die Einflüsse der unterschiedlichen verwendeten Zeitschrittsteuerungsalgorithmen oder Gleichungslösungsverfahren auf die gezeigten Berechnungsergebnisse?“ Die speziell in den aufgeführten Beispielen 2 und 3 erkennbaren Antworten müssen dabei nicht zwangsläufig auf TH<sup>2</sup>M-Berechnungen oder auf andere Simulatoren übertragbar sein.

Bei dem in Abschnitt 2.2.3 präsentierten Beispiel aus dem Benchmarking-Projekt MoMaS stellt sich die erstgenannte Frage hingegen nicht, und die zweitgenannte Frage wird dort somit durch die Ergebnisgraphen aus Bild 2.14 beantwortet.

Bild 2.8 zeigt zusätzlich den Aspekt der zeitlichen Extrapolation der Diskrepanzen auf, dem insbesondere vor dem Hintergrund eines im Rahmen einer Langzeitsicherheitsanalyse zu betrachtenden und mehrere 100.000 Jahre umfassenden Prognosezeitraums eine signifikante Bedeutung beigemessen werden kann. Bei irreversiblen zeitabhängigen Entwicklungen von Zustandsgrößen, deren Zahlenwertebereiche prinzipiell unbeschränkt sind (z.B. Deformationen oder auch Strahlendosen), können sich auch eher geringfügig erscheinende numerisch bedingte Unterschiede in den Berechnungsergebnissen in einem Simulationszeitraum von wenigen Jahren bei einer Übertragung auf sehr lange Zeiträume bedeutsam akkumulieren.

Mit dem Forschungsvorhaben „BenVaSim“ sollen vom Standpunkt der TUC aus weitere vertiefte Verifikationsarbeiten an dem im BMWi-Forschungsvorhaben 02E11041 entwickelten und bis zu einem gewissen Grad bereits verifizierten FTK-Simulator im Rahmen eines Benchmarkings durchgeführt werden. Als Konsequenz aus den vorstehend zusammengetragenen Beobachtungen ergeben sich für das Ziel der Verifizierung des FTK-Simulators und zugleich auch der anderen in das BenVaSim-Projekt eingebrachten Simulatoren die folgenden Voraussetzungen und Bedingungen für das durchzuführende Benchmarking:



- Die Vorgaben für die Modellierungsaufgaben dürfen idealerweise keinen bzw. de facto nur einen *minimalen Interpretationsfreiraum* für die beteiligten Forschungsteams bieten. Die beiden Diagramme in Bild 2.9 veranschaulichen die Auswirkungen von unterschiedlichen Interpretationsfreiräumen auf die Berechnungsergebnisse. Zwar sind manche physikalischen Beziehungen wie beispielsweise die Abhängigkeiten der Dichten und Viskositäten der unterschiedlichen fluiden Phasen von den jeweiligen Fluiddrücken und von der Temperatur in einigen der zu verifizierenden Simulatoren fest vorgegeben, und nicht jedes Team hat im Rahmen des BenVaSim-Projekts oder auch generell die Möglichkeit, Eingriffe in den Programmcode des von ihm eingebrachten Simulators vorzunehmen. Die Ausführungen zum zweiten hier angeführten DECOVALEX-Beispiel und dort speziell zum Einfluss der Streckenauffahrung auf das Streckennahfeld (Mine-by-Test) zeigen aber, dass eine unvollständige Homogenisierung der physikalischen Modelle der einzelnen Teams für einen Simulatorenvergleich nicht zielführend ist.
- Mit Blick auf den vorstehend aufgeführten Spiegelstrich sollten die einzusetzenden Simulatoren auch nicht gänzlich unterschiedliche *Modellierungsansätze* verfolgen, d.h. es sollten keine auf kontinuumsmechanischen Ansätzen aufgebauten Simulatoren – auf der Finite-Differenzen-Methode (FDM), auf der integralen FDM (IDFM, = Finite-Volumen-Methode, FVM) oder auf der Finite-Elemente-Methode (FEM) – an Diskontinuitäten orientierte Simulatoren – über die Diskrete-Elemente-Methode (DEM) oder über ein „Discrete Fracture Network“ (DFN) – gegenübergestellt werden. Die in Abschnitt 3.1.4 genannten Simulatoren, die im Rahmen des BenVaSim-Projekts zum Einsatz gebracht werden, können alle dem Typ der kontinuumsmechanisch basierten Simulatoren zugeordnet werden.
- Die Wahl der *Modelldiskretisierungen* hängt bis zu einem gewissen Grad davon ab, ob es sich bei dem jeweiligen Simulator um einen FDM-, um einen IFDM/FVM- oder um einen FEM-Simulator handelt und welche Arten der Diskretisierung er unterstützt. Dabei sollte aber auch für die Wahl der Diskretisierungen kein zu großer Freiraum gewährt werden, da beispielsweise unterschiedlich Feinheitsgrade in Bereichen der Diskretisierung in der Regel auch – zumindest lokal, wenn nicht gar weiträumiger – zu signifikanten Unterschieden in den Berechnungsergebnissen führen können.
- Analoge Bedingungen wie für die räumlichen Modelldiskretisierungen gelten auch für die zeitlichen Modelldiskretisierungen, d.h. auch stark unterschiedliche *Zeitschrittweiten*

können ebenfalls zu signifikanten Diskrepanzen in den Berechnungsergebnissen führen. Diese Diskrepanzen beschränken sich dabei üblicherweise nicht mehr nur auf den Zeitabschnitt mit den unterschiedlichen Zeitschrittweiten, sondern werden ab ihrem erstmaligen Auftreten für gewöhnlich bis zum Simulationsende weitergetragen.

- Da im Rahmen einer Simulatorverifizierung lediglich eine Übereinstimmung der mit den unterschiedlichen Simulatoren erhaltenen Berechnungsergebnisse miteinander angestrebt wird, sind hierfür im Gegensatz zu den aufgeführten DECOVALEX-Beispielen auch **keine Messdaten realer Experimente** zum Abgleich mit den Simulationsergebnissen erforderlich (Simulatoren-Benchmarking). Nachkalibrierungen von Modellen entfallen somit ebenfalls.

### 2.3 Bisherige Arbeiten und Erfahrungen des Vorhabensbearbeiters

Zur Bearbeitung des Forschungsvorhabens bestehen an der TUC langjährige und spezielle Erfahrungen auf dem Gebiet der geomechanischen Forschung zur Endlagerung radioaktiver und zur untertägigen Deponierung chemisch-toxischer Abfälle, die in den Abschlussberichten zu diversen BMBF-/BMWi-/BMU-Forschungsvorhaben, mehreren Forschungsvorhaben der EU und des BfS und in mehreren Veröffentlichungen dokumentiert sind. Diese Erfahrungen erstrecken sich auch über die physikalische Modellierung von Gesteins- und Gebirgseigenschaften inklusive der Entwicklung von mechanischen Stoffmodellen mithilfe eigener laborativer und numerischer Untersuchungen (z.B. *modLubby2*, *Lerche, 2012*) sowie über die numerische Simulation von Endlagerteilsystemen mit unterschiedlichen Simulatoren, die speziell an die erarbeiteten Charakteristika der zu simulierenden Gesteinstypen angepasst worden sind (z.B. die Erweiterung INFIL für den Simulator MISES3, *Lux et al., 2009*). Die Erfahrungen der TUC insbesondere zum potenziellen Endlagerwirtsgestein Tonstein, die vornehmlich im Rahmen der in Bild 2.15 aufgelisteten Forschungsvorhaben erarbeitet worden sind, sind u.a. in den entsprechenden Abschlussberichten dokumentiert, *Lux et al. (2018, 2015, 2012, 2006, 2005)*, *Lux & Seeska (2010)*. Die umfangreiche laborative Ausstattung, die an der TUC für Untersuchungen zum thermomechanischen und hydromechanischen Verhalten von endlagerbezogenen Geomaterialien (Gesteine, Abdichtungen, Versatz) vorhanden ist, wird um eine erste derzeit in der Kalibrierungsphase befindliche Prüfanlage für Untersuchungen von Zweiphasenströmungen unter auch mechanischen und thermischen Einwirkungen erweitert, *Zhao (2017)*.



Der wichtigste Vertreter der von der TUC im Verlauf der Zeit ausgearbeiteten und weiterentwickelten physikalischen Modelle begann Ende der Neunzigerjahre als Stoffmodell *Hou/Lux* für Salzgesteine, welches auf dem viskoplastischen Stoffmodell *Lubby2* basiert und einen Schädigungsansatz beinhaltet, *Hou (2002)*. Aufgrund mehrerer grundlegender Erweiterungen im Bereich der Salzgesteine, die u.a. einen Verheilungsansatz umfassen, ist das Stoffmodell *Hou/Lux* mittlerweile in das viskoplastische Stoffmodell *Lux/Wolters* übergegangen, *Wolters (2014)*. Zwischenzeitlich ist auch parallel zu diesen Erweiterungen eine Übertragung des Stoffmodells *Hou/Lux* auf Tongesteine erfolgt, welches u.a. die für diesen Gesteinstyp charakteristische Anisotropie hinsichtlich von Spannungszuständen und Schädigungsprozessen berücksichtigt und den Namen *Hou/Lux-T* erhalten hat, *Lux et al. (2006)*. Das viskoplastische Stoffmodell *Hou/Lux-T* ist im Grundsatz phänomenologisch-makroskopisch orientiert und erfasst die Wirkungen der verschiedenen Deformationsmechanismen vornehmlich integral.

Mit der Anschaffung des TH<sup>1</sup>M-Simulators *FLAC<sup>3D</sup>* (Einphasenströmung) vor mehr als zehn Jahren konnten dann die unterschiedlichen mechanischen Stoffmodelle für die numerische Simulation nutzbar gemacht werden. Inzwischen sind auch andere für das beantragte Vorhaben relevante Erweiterungen am Simulator *FLAC<sup>3D</sup>* vorgenommen worden. Ein bekanntes HM-Stoffmodell für Lockergestein, das *Barcelona Basic Model (BBM)*, das im Bereich der Endlagerforschung für Bentonitverfüllungen international zum Einsatz kommt, ist in *FLAC<sup>3D</sup>* implementiert worden. Als wichtigster Meilenstein jedoch ist in dem vorangegangenen mehrjährigen Forschungsvorhaben 02E11041 eine Kopplung an den thermohydraulischen Simulator *TOUGH2* erfolgt, *Lux et al. (2015)*. Motiviert vor allem durch das Fehlen von Zweiphasenflussprozessen in *FLAC<sup>3D</sup>* und durch die lösungsverfahrensbedingte Begrenzung der numerischen Zeitschrittweite, die extrem lange Berechnungszeiträume für HM-gekoppelte Simulationen in *FLAC<sup>3D</sup>* impliziert, ist im genannten Vorhaben ein leistungsfähiger Simulator für TH<sup>2</sup>M-gekoppelte Prozesse entwickelt worden. Dieser *FLAC<sup>3D</sup>-TOUGH2-Kopplungs-Simulator* (FTK-Simulator) soll im Rahmen des BenVaSim-Projekts anhand von Vergleichsberechnungen (Benchmarking) validiert und vertieft verifiziert werden.



Bild 2.15: Bisherige und aktuelle Forschungsvorhaben des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik der TUC im Bereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle im Tongestein: Lux et al. (2018, 2015, 2012, 2006, 2005), Lux & Seeska (2010), Lux & Rutenberg (vorliegender Bericht)



### **3 Zum internationalen Benchmarking-Projekt „BenVaSim“**

#### **3.1 Grundstruktur des BenVaSim-Projekts**

##### **3.1.1 Genereller Projektlauf**

Während der Bearbeitungszeit der beiden BMWi-Forschungsvorhaben 02E11041 und 02E11506 sind vom Projektinitiator TUC Kontakte zu fünf nationalen und internationalen Organisationen/Arbeitsgruppen geknüpft und gepflegt worden, die ein Interesse an einer Teilnahme an einem Simulatoren-Benchmarking gezeigt und bekräftigt haben. Jeder der somit insgesamt sechs Partner besitzt einen oder mehrere Simulatoren und verfügt über Erfahrungen im Einsatz dieser Simulatoren im Bereich der Endlagersystemanalyse, die er durch das Benchmarking zu erweitern und zu festigen beabsichtigt, ggf. auch durch eine Weiterentwicklung dieser Simulatoren. Es ist daher vorgesehen, dass die Partner im Rahmen des BenVaSim-Projekts Modellbeispiele unter mehreren Variationssituationen, auf die sich gemeinsam zu Beginn und im weiteren Verlauf des Projekts geeinigt wird, mit den von ihnen in das Benchmarking eingebrachten Simulatoren bearbeiten und die auf diese Weise erhaltenen Berechnungsergebnisse im Anschluss in einem kritischen Diskurs auswerten. Die Gegenüberstellung der Ergebnisse der sechs Parteien wird dabei zentral vom Projektkoordinator vorgenommen.

Regelmäßig veranstaltete interne Fachtreffen stellen die Plattform dar, auf der sich die Partner über Ergebnisse austauschen, sich den Stand des Bearbeitungsfortschritts des Projekts mit Blick auf das erarbeitete Bearbeitungsprogramm (Modellbeispiele/Variationen) vergegenwärtigen und ggf. dieses Programm aktualisieren sowie das weitere Vorgehen miteinander abstimmen.

Abschließend werden zumindest von den durch das BMWi geförderten Partnern TUC und GRS BS Abschlussberichte über die von ihnen jeweils durchgeführten Arbeiten erstellt sowie von der TUC ein Synthesebericht über die Resultate des BenVaSim-Projekts in Abstimmung mit den Partnern verfasst, in dem sowohl die verwendeten Simulatoren wie auch die zentralen Berechnungsergebnisse und deren Gegenüberstellung präsentiert werden. Regeln für die Zusammenarbeit und die Ergebnisnutzung zwischen den Partnern werden in einer Kooperationsvereinbarung festgehalten, die zu Beginn des Zeitraumes des Hauptprojekts gemeinschaftlich ausgearbeitet wird und damit auch insbesondere die Zusammenarbeit zwischen den beiden vom BMWi geförderten Partnerorganisationen TUC und GRS BS regelt.



### 3.1.2 Gesamtziele des Projekts

Gemäß dem in Abschnitt 1.1 formulierten zentralen Ziel des Projekts, längerfristig mehrere numerisch als korrekt belegte sowie geotechnisch angemessen aussagekräftige und damit zumindest in einem ersten grundlegenden Schritt auch qualitätsgesicherte numerische Simulatoren für die Durchführung von fluiddynamischen Analysen zum Endlagersystemverhalten als Grundlage für die Erarbeitung von Langzeitsicherheitsanalysen verfügbar zu haben, besteht die übergeordnete Zielstellung des vorgesehenen Benchmarkings in der Verifizierung und Validierung mehrerer voneinander unabhängiger TH<sup>2</sup>M-Simulatoren, die national bereits im Endlagerforschungsbereich zum Einsatz kommen. Diese hier vorgesehenen Forschungsarbeiten zur Qualitätssicherung sollen in einem internationalen Rahmen durchgeführt werden, um auch die Erfahrungen internationaler Organisationen im Bereich der Simulation des Endlagersystemverhaltens in den nationalen Kenntnisstand miteinfließen zu lassen (und umgekehrt auch den Kenntnisstand der internationalen Organisationen durch die Forschungsarbeiten dieses Vorhabens zu erweitern). Eine detailliertere Erläuterung der Zielstellungen des BenVaSim-Projekts aus Sicht der TUC ist in Abschnitt 1.2 erfolgt.

### 3.1.3 Teilnehmer, Koordination und Organisation

Die sechs am BenVaSim-Projekt teilnehmenden Partnerorganisationen bzw. Arbeitsgruppen sind, inklusive der Förderkennzeichen ihrer dem BenVaSim-Projekt zugeordneten Forschungsvorhaben (so bekannt, derzeitiger Stand):

- der Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik der **Technischen Universität Clausthal (TUC)**, Clausthal-Zellerfeld (BMWi-Vorhaben 02E11567A),
- der Fachbereich „Geotechnische Sicherheitsnachweise“ der **Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR)**, Hannover,
- die Sektion „Tiefenlagerung & Sicherheitsanalysen“ des **Eidgenössischen Nuklearsicherheitsinspektorates (ENSI)**, Brugg, Schweiz,
- der Bereich „Endlagerforschung“ der **Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH, Braunschweig (GRS BS)** (BMWi-Vorhaben 02E11567B),



- der Bereich „Strahlen- und Umweltschutz“ der **Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH, Köln (GRS K)** (BMUB-Vorhaben 3616E03230) sowie
- das Hydrogeology Department des **Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL)**, Berkeley, Kalifornien, USA.

Die das BenVaSim-Projekt initiiierende TUC wird die Rolle des Koordinators übernehmen und in dieser Eigenschaft eine Steuerungsfunktion mit Blick auf die Richtung der Arbeiten aller Partner und den generellen Bearbeitungsfortschritt innehaben. Der Koordinator wird auf dem Kick-off-Treffen Vorschläge für das Zusammenarbeitsvereinbarungsdokument, erste Modellbeispiele, Berechnungsvariationen und Auswertungspunkte/Schnitte der Beispielmodelle unterbreiten sowie auf den Fachtreffen die darauf jeweils folgenden Arbeitsschritte und damit verbunden ggf. Adaptionen am Bearbeitungsprogramm vorschlagen. Während der unterschiedlichen Projektstufen (1D-, 2D-, 3D-, Feldsimulationen) wird der Koordinator zudem die Berechnungsergebnisse der Partner zusammentragen sowie eine Gegenüberstellung und eine erste kritische Würdigung vornehmen und darüber hinaus Vorschläge für Modellbeispiele für die jeweils folgende Stufe vorstellen. Sowohl das Kick-off-Treffen wie auch die Abschlussveranstaltung für das BenVaSim-Projekt werden vom Koordinator organisiert. Am Ende des Projekts wird auch der Synthesebericht vom Koordinator verfasst.

Jeder der sechs Partner beteiligt sich am BenVaSim-Projekt mit Simulations- und Auswertungsarbeiten zu den vereinbarten Berechnungsvariationen aus dem gemeinschaftlich beschlossenen Bearbeitungsprogramm sowie der Bereitstellung der auf diese Weise erhaltenen Ergebnisse für die Fachtreffen. Die rechnerischen Arbeiten der Partner können darüber hinaus ggf. auch Weiterentwicklungen der eigenen Simulatoren mit Blick auf Berechnungsvariationen, die bis dato noch nicht von besagten Simulatoren bearbeitet werden können, umfassen. Auf den Fachtreffen werden die Berechnungsergebnisse dann gemeinschaftlich analysiert und Erfahrungen für die weiteren Arbeitsschritte abgeleitet. Vorträge können sowohl im Rahmen der Fachtreffen wie auch im Rahmen der Ergebnispräsentation auf nationalen und internationalen Konferenzen von jedem Partner nach Maßgabe der Zusammenarbeitsvereinbarung gehalten werden. Es ist beabsichtigt, die Fachtreffen an wechselnden Orten stattfinden zu lassen, d.h. die Partner übernehmen dann auch die Ausrichtung von Fachtreffen mit.



### 3.1.4 Simulatoren und Modellbeispiele

Beteiligte Simulatoren werden nach derzeitigem Stand sein:

- der im Rahmen der BMWi- und BMBF-Forschungsvorhaben 02E11041, 02S9082A und 02E11506 entwickelte **FTK-Simulator** in der Version 3.00 (siehe Abschnitt 4) oder höher,
- der am LBNL entwickelte Simulator **TOUGH-FLAC**, der die Bestandteile TOUGH2 und FLAC<sup>3D</sup> auf eine vom FTK-Simulator abweichende Art und Weise miteinander koppelt, sowie ein von der GRS Köln parallel dazu weiterentwickelte Variation von TOUGH-FLAC mit der Bezeichnung **TFC**,
- **CODE\_BRIGHT**,
- **OpenGeoSys** sowie
- **COMSOL Multiphysics**.

In Abschnitt 3.2 werden die vorstehend genannten Simulatoren und ihre Eigenschaften im Einzelnen und mit Blick auf die Erstellung von Modellbeispielen und Berechnungsvariationen, die von möglichst vielen Simulatoren bearbeitet werden können, vorgestellt.

Da bei dem hier vorgesehenen Benchmarking im Gegensatz zu anderen ähnlichen Forschungsprojekten weniger die Erarbeitung von individuellen Stoffmodellen oder Prozesskopplungsbeziehungen, sondern vielmehr die schon vorhandenen und in der Forschung eingesetzten Simulatoren und deren Verifizierung und Validierung im Vordergrund stehen, wird mit Blick auf die Vergleichbarkeit der Simulationsergebnisse angestrebt, dass für die durchzuführenden numerischen Simulationen eher nur wenig spezialisierte mechanische Stoffmodelle und auch eher gängige physikalische Beziehungen (z.B. Kopplungsbeziehungen, Relativpermeabilitäts- und Kapillardruckfunktionen) eingesetzt werden, die von möglichst vielen bzw. im Idealfall von allen beteiligten Simulatoren rechnerisch umgesetzt werden können. Die Vielzahl von Prozessen, Beziehungen und auch mechanischen Stoffmodellen, die von den oben genannten Simulatoren einbezogen und unterstützt werden, ermöglicht dabei auch schließlich das Zustandekommen von Berechnungsvariationen, die von allen oder fast allen Benchmarking-Partnern bearbeitet werden können.

Das in Bild 3.1 veranschaulichte Spektrum der generischen Modellbeispiele beginnt bei abstrahierten eindimensionalen Modellen, bei denen das zeitabhängige Zusammenwirken aus unterschiedlichen Anfangszuständen (im selben Modell) raumbeschränkungsbedingt noch keine größeren Unterschiede in den Simulationsergebnissen erwarten lässt und bei denen überdies ein Vergleich mit analytischen Lösungen der physikalischen Gleichungen unter bestimmten zusätzlichen restriktiven Modellannahmen (z.B. Einphasenfluss) möglich ist. In den folgenden Stufen werden dann zunächst zweidimensionale Strecken- oder Kammerquerschnittsmodelle

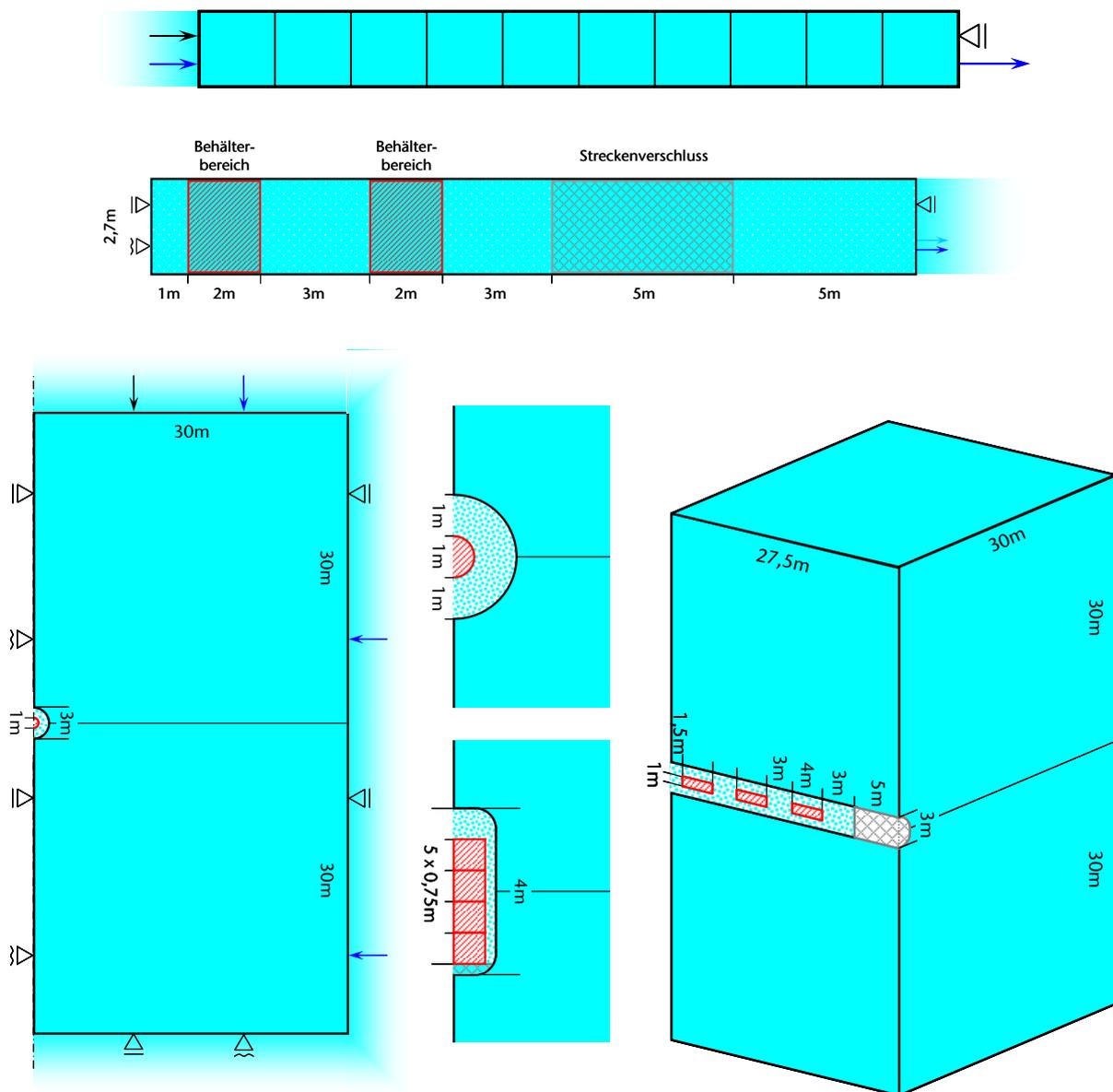


Bild 3.1: Vorschläge für generische 1D-, 2D- und 3D-Beispielmodelle mit endlagerrelevanten Einwirkungen für das beantragte Benchmarking aus Lux et al. (2015)

unter Variation von Stoffmodellen, Materialparametern und Modellgeometrien sowie abschließend ein dreidimensionales Modell in Betracht gezogen. Da erfahrungsgemäß nicht zu erwarten ist, dass

- (a) geplante Simulationen sich numerisch reibungslos durchführen lassen – insbesondere mit einem neu entwickelten Simulator, mit dem im Vergleich zu bewährten Simulatoren noch relativ wenige Erfahrungen vorliegen, dass
- (b) stets korrekte, nachvollziehbare und vor allem näherungsweise identische Simulationsergebnisse mit allen Simulatoren erhalten werden und dass
- (c) insbesondere bei räumlich komplexeren Modellen die Ursachen der zu erwartenden Unterschiede (z.B. Fehler wie Eingabefehler, Programmierfehler, numerische Fehler oder Diskretisierungsfehler oder aber auch physikalische Modellierungsunterschiede) auf einfache Weise geortet werden können,

sollte die Anzahl der Berechnungsvariationen für das generische dreidimensionale Berechnungsmodell wiederum stark abnehmen. Für ein finales Berechnungsmodell kann, wenn die vorherigen Benchmarkingstufen erfolgreich absolviert werden sollten, ein reales In-situ-Experiment numerisch abgebildet und vergleichend simuliert werden.

Konkrete Vorschläge für Beispielmodelle für die erste Stufe des BenVaSim-Projekts sind bereits für das Kick-off-Treffen von der TUC vorbereitet worden. Dabei handelt es sich um ein-dimensionale Beispielmodelle zu Dammbauwerken und Einlagerungsstrecken entsprechend dem oberen Teil in Bild 3.1 sowie zu einer nicht dargestellten Aufgabenstellung aus der Erdstatik (Konsolidation). Vorgesehene zweiseitige Prozesskopplungen sind dabei  $H^1M$ ,  $H^2M$ ,  $TH^1$  (Beispiel aus *Kolditz et al., 2012b*) und THM sowie im Zusammenhang mit einem Beispiel auch  $H^2$  zur Verifizierung der Simulatoren anhand von komplexeren analytischen Lösungen für die Porendrücke und für die Sättigungen.

### 3.1.5 Berechnungen, Auswertungen und Gegenüberstellung der Ergebnisse

Im Hinblick auf die Verifikation der beteiligten Simulatoren sollte die Simulation einer jeden Variationssituation von den beteiligten Projektpartnern mit möglichst gleichen Voraussetzungen erfolgen. Eine individuelle Wahlfreiheit von mechanischen Stoffmodellen, zu berücksichtigenden Prozessen (z.B. Kapillardruckfunktionen) oder anderen Aspekten der *Prozessmodellierung* besteht hier nach der gemeinsamen Einigung auf Berechnungsvariationen dann nicht



mehr. Hingegen können numerische Einflussfaktoren bei der Modellierung sehr wohl von jedem Bearbeiter individuell gemäß den eigenen Erfahrungen sinnvoll gewählt werden, da die numerischen Verfahren, die den unterschiedlichen Simulatoren zugrunde liegen, auch unterschiedliche Eigenschaften und Stellschrauben besitzen. Die Diskretisierung der Modelle kann sowohl unter dem Gesichtspunkt der wahlfreien numerischen Einstellungen individuell wählbar bleiben wie auch bei allen Partnern auf identische Weise erfolgen aufgrund ihres im allgemeinen nicht unerheblichen Einflusses auf Berechnungsergebnisse. Zu diesem Zweck wird in Erwägung gezogen, Konversionsfunktionen für den Transport von durch FLAC<sup>3D</sup> erstellten Diskretisierungen zu den Simulatoren der Partner zu implementieren. Diese Vorgehensweise ist zusammen mit der Einigung auf erste Modellbeispiele auf dem Kick-off-Treffen von den Partnern gemeinsam zu beschließen.

Die Konstruktion eines jeden Beispielmodells beinhaltet auch die Festlegung von Bereichen in diesem Modell (Punkte, lineare Schnitte, Querschnitte), in denen ein für die Analyse des mit dem Beispielmodell abstrahierten Endlagerteilsystems repräsentatives mechanisches, thermisches oder hydraulisches Verhalten erwartet werden kann. Die Erfassung der mit diesem Verhalten verbundenen Prozessgrößen ist von jedem Projektpartner entsprechend der Möglichkeiten der von ihm eingesetzten Simulatoren individuell durchzuführen. Für den Koordinator sind dann die auf diese Weise erhaltenen Daten, die in die Gegenüberstellung mit den Ergebnisdaten der Partner eingehen sollen, in ein gemeinsam nutzbares Datenformat (z.B. in eine MS-Excel-Tabelle) zu übertragen. Der Koordinator wird in diesem Format Vorlagen zur Visualisierung der Ergebnisse erstellen und für die Partner bereitstellen, um die Gegenüberstellung der Berechnungsergebnisse zu beschleunigen und in uniformen Diagrammen darstellen zu können.

## **3.2 Simulatoren der Projektteilnehmer**

### **3.2.1 Übersicht zu den eingesetzten Simulatoren**

In Tabelle 3.1 ist aufgelistet, welche der in Abschnitt 3.1.3 genannten Projektpartner mit welchen der in Abschnitt 3.1.4 genannten Simulatoren am BenVaSim-Projekt teilzunehmen beabsichtigt.



Projektpartner	Simulatoren
TUC	· FTK
BGR	· OpenGeoSys
ENSI	· TOUGH-FLAC · OpenGeoSys · COMSOL Multiphysics
GRS BS	· CODE_BRIGTH
GRS K	· TFC
LBNL	· TOUGH-FLAC

*Tabelle 3.1: Eingesetzte Simulatoren der BenVaSim-Projektpartner*

Die in der Tabelle 3.1 aufgeführten Simulatoren werden in den folgenden Abschnitten detaillierter und mit Blick auf die ihnen zugrunde liegenden physikalischen Ansätze erläutert, wobei auch auf den Erfahrungsstand der Projektpartner im Umgang mit den von ihnen eingesetzten Simulatoren eingegangen wird. Da mehrere der eingesetzten Simulatoren auf den bestehenden Programmen FLAC<sup>3D</sup> und TOUGH2 basieren und dementsprechend weitgehend auf denselben Ansätzen für die TH<sup>2</sup>M-Simulation beruhen, werden diese beiden Programme in den Abschnitten 3.2.2 und 3.2.3 gesondert vorgestellt und erläutert, bevor in den Abschnitten 3.2.4 und 3.2.5 auf die Simulatorkopplungen FTK und TOUGH-FLAC/TFC eingegangen wird und dabei insbesondere die an der TUC erarbeiteten Kenntnisse mit dem FTK-Simulator dargestellt werden. Die drei weiteren Simulatoren CODE\_BRIGTH, OpenGeoSys und COMSOL Multiphysics werden dann in den Abschnitten 3.2.6, 3.2.7 und 3.2.8 erläutert. Abschließend erfolgt in Abschnitt 3.2.9 eine Gegenüberstellung der modellierten Prozesse und Eigenschaften der sechs Simulatoren mit Vorschlägen zu möglichen Weiterentwicklungen des FTK-Simulators.

### **3.2.2 Zum Simulator FLAC<sup>3D</sup> für geomechanische Aufgabenstellungen**

Die Software FLAC<sup>3D</sup> (Fast Lagrangian Analysis of Continua in 3 Dimensions) liegt derzeit beim BenVaSim-Projektpartner TUC in den Versionen 5.0 und 4.0 vor. Die in diesem Bericht angegebenen Informationen über FLAC<sup>3D</sup> und seine Funktionsweise stammen, wenn nicht anders angegeben, aus den entsprechenden Benutzerhandbüchern *Itasca (2012, 2009)*. Zudem

kann eine detailliertere Beschreibung der in FLAC<sup>3D</sup> verwendeten mechanischen, hydraulischen und thermischen Prozessgleichungen dem Abschlussbericht zum vorangehenden BMWi-Forschungsvorhaben 02E1 1041 über die Kopplung von FLAC<sup>3D</sup> mit dem thermohydraulischen Simulator TOUGH2 entnommen werden, *Lux et al. (2015)*.

### *Simulationsprozess und Eigenschaften von FLAC<sup>3D</sup>*

Die Beziehungen zwischen den zentralen mechanischen Größen Spannungen, Verzerrungen und Verschiebungen werden im Simulator FLAC<sup>3D</sup> durch die Differenzialgleichung (3.1) (*Cauchy*sche Bewegungsgleichung) und die beiden für eine inkrementelle Berechnung formulierten Gleichungen (3.2) (Verzerrungsraten-Verschiebungsraten-Beziehung in linearisierter Form) und (3.3) (mechanisches Stoffmodell) beschrieben:

$$\nabla \cdot \sigma_{tot} - \rho g = -\rho \dot{v} \quad (3.1)$$

$$\dot{\varepsilon}_{lin} = -\frac{1}{2}(\nabla v + (\nabla v)^T) \quad (3.2)$$

$$\dot{\sigma}_{eff}^{\cup} = f(\varepsilon_{lin}^m; \sigma_{tot}; \dots) \quad (3.3)$$

mit

$\sigma_{tot}$  Totalspannungstensor in *MPa*,  $\sigma_{tot} = \sigma_{eff} + \alpha p I$  mit

$\sigma_{eff}$  Effektivspannungstensor in *MPa*,  $\alpha$  *Biot*-Koeffizient, dimensionslos,

$p$  Porendruck in *MPa*,

$\rho$  Massendichte des Gebirgsmaterials in *kg/m<sup>3</sup>*,  $\rho = (1 - \phi)\rho_s + \phi S_l \rho_l$  mit

$\rho_s, \rho_l$  Massendichte des Feststoffs (Gesteinskörner) bzw. des Porenwassers,

$\phi$  Porosität des Gebirgsmaterials, dimensionslos,  $S_l$  Wassersättigung, dimensionslos,

$g$  Erdbeschleunigungsvektor in *m/s<sup>2</sup>*,  $g = [0 \ 0 \ -9,81]^T$  *m/s<sup>2</sup>*,

$v$  materielle Geschwindigkeit in *m/s*,

$\varepsilon_{lin}$  linearisierter Verzerrungstensor, dimensionslos,  $\varepsilon_{lin} = \varepsilon_{lin}^m + \varepsilon_{lin}^{th}$  mit

$\varepsilon_{lin}^m; \varepsilon_{lin}^{th}$  mechanischem bzw. thermischem Anteil,

$\sigma_{eff}^{\cup}$  mitrotierender Effektivspannungstensor in *MPa*,  $\dot{\sigma}_{eff} = \dot{\sigma}_{eff}^{\cup} + \zeta_{corr}$  mit

$\zeta_{corr}$  Korrektortensor zur Koordinatentransformation in *MPa/s*,

$f$  Funktion zur Beschreibung des Stoffmodells in *MPa/s*,

... weitere Eingangsdaten für die Stoffmodellfunktion.



Die eingerückten Zeilen in der obigen Erläuterung der Bezeichner spezifizieren dabei physikalische Größen, zwischen denen im Fall von mechanischen Kriechprozessen bzw. im Fall einer Kopplung mit hydraulischen bzw. thermischen Prozessen zu differenzieren ist. Bei einer Simulation mit FLAC<sup>3D</sup> können in beschränktem Maß auch hydraulische (Einquasfluss) sowie thermische Strömungsprozesse (isotrope Wärmeleitung) berücksichtigt werden, die über die Materialparameter *Biot*-Koeffizient, *Biot*-Modul und thermischer Längenausdehnungskoeffizient Einfluss auf die mechanischen Prozesse ausüben bzw. ihrerseits von mechanischen Deformationen beeinflusst werden. Die Porositäten der modellierten Geomaterialien bleiben in FLAC<sup>3D</sup> allerdings konstant, wenn der Benutzer keine Funktionen zu ihrer Adaption definiert. Bei Nichtberücksichtigung von hydraulischen und thermischen Einflüssen und größeren Materialverformungen sind jeweils die Zustandsgrößen  $\sigma_{tot}$ ,  $\sigma_{eff}$  und  $\sigma_{eff}^U$ , die Zustandsgrößen  $\varepsilon_{lin}$  und  $\varepsilon_{lin}^m$  sowie die Zustandsgrößen  $\rho$  und  $(1 - \phi)\rho_s$  identisch.

In FLAC<sup>3D</sup> wird eine explizite Finite-Differenzen-Methode (FDM) zur numerischen Lösung der drei Differenzialgleichungen (3.1) bis (3.3) verwendet. Zur Berechnung des Gleichgewichtszustands („Balancierung“) werden die genannten Gleichungen dabei von FLAC<sup>3D</sup> sukzessiv-iterativ gelöst, d.h. in einem wiederkehrenden Zyklus werden aus vorab bekannten Spannungen und angesetzten Kräften Knotengeschwindigkeiten, aus den Knotengeschwindigkeiten Verzerrungsraten und aus den Verzerrungsraten wiederum aktualisierte Spannungen berechnet, bis ein Fehlerterm (die „unbalancierten Kräfte“) eine vom Benutzer angegebene Grenze unterschreitet und numerische Konvergenz signalisiert. Bei zeitabhängigen Berechnungen, also insbesondere bei HM-gekoppelten Simulationen, wird dieser Lösungsalgorithmus in jedem Zeitschritt ausgeführt, wobei eine programminterne Steuerung des maximalen Zeitschrittes sicherstellt, dass das Lösungsverfahren numerisch stabil bleibt. Der Vorteil der automatisch sichergestellten numerischen Stabilität hat bei diesem Verfahren allerdings den Nachteil, dass die Simulationsdauer bei zeitabhängigen Langzeitsimulationen mitunter extrem stark ausgedehnt ist.

FLAC<sup>3D</sup> verfügt über eine sehr anschauliche und verständliche grafische Benutzeroberfläche (GUI – graphical user interface) und beinhaltet somit auch eigene Prä- und Postprozessorfunktionalitäten, die die Software insgesamt sehr benutzerfreundlich gestalten. Semitransparente Modellstrukturen und Randbedingungsmarkierungen sind ebenso darstellbar wie interpolierte Niveauliniendiagramme (contour plots), interpolierte Schnitte (profiles) und aufgezeichnete



Zeitreihen (histories). Eine diskretisierte Modellstruktur wird dabei vom Benutzer aus einzelnen, in ihrer geometrischen Konfiguration vorgegebenen und vordiskretisierten Teilstrukturen (primitive mesh shapes) zusammengesetzt, die ihrerseits aus jeweils mehreren Zonen aufgebaut sind. Dazu stehen einfachere vordiskretisierte Teilstrukturen wie z.B. Hexaeder und Viertelzylinder oder auch komplexere vordiskretisierte Teilstrukturen zum vereinfachten Aufbau von Tunneltragsystemen zur Verfügung. Des Weiteren umfasst das Programm FLAC<sup>3D</sup> auch eine interne Programmiersprache namens FISH (abgeleitet von „FLACish“), mit der neben Berechnungen von abgeleiteten Größen auch Implementierungen von zusätzlichen Prozessgleichungen wie z.B. Porositäts-Permeabilitäts-Beziehungen sowie auch eine Kommunikation mit externen Programmen über Textdateien möglich sind. Außerdem ist die Implementierung zusätzlicher benutzerdefinierter mechanischer Stoffmodelle über eine C++-Schnittstelle des Programms möglich.

### *Mechanische Stoffmodelle in FLAC<sup>3D</sup>*

Als Simulator für primär geomechanische Prozesse in Tragsystemen untertägiger geotechnischer Bauwerke bietet FLAC<sup>3D</sup> eine umfassende Auswahl an Stoffmodellen zur physikalischen Modellierung unterschiedlichster geologischer, geotechnischer und technischer Materialien von einfachen linear-elastischen Stoffmodellen über elastoplastische Stoffmodelle mit unterschiedlichen Fließ-/Bruchbedingungen (pseudoplastisches Materialverhalten) bis hin zu viskosen Stoffmodellen für Salinalgestein und Salzgrusversatz an. Werden die mechanisch wirksamen Spannungen  $\sigma_{eff}$  und die durch sie induzierten Verzerrungen  $\varepsilon_{lin}^m$  gemäß den Gleichungen (3.4) bzw. (3.5) in Komponenten dargestellt mit

$$\sigma_{eff} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{bmatrix}, \quad \check{\sigma}_{eff} = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \end{bmatrix}, \quad (3.4)$$

$$\varepsilon_{lin}^m = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & \frac{1}{2}\gamma_{xy} & \frac{1}{2}\gamma_{xz} \\ \frac{1}{2}\gamma_{xy} & \varepsilon_y & \frac{1}{2}\gamma_{yz} \\ \frac{1}{2}\gamma_{xz} & \frac{1}{2}\gamma_{yz} & \varepsilon_z \end{bmatrix}, \quad \check{\varepsilon}_{lin}^m = \begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{xz} \\ \gamma_{yz} \end{bmatrix} \quad (3.5)$$



mit (für  $i, j \in \{x; y; z\}$ ,  $i \neq j$ )

$\sigma_i$  Normalspannungen in *MPa*,

$\tau_{ij}$  Schubspannungen in *MPa*,  $\tau_{ji} = \tau_{ij}$ ,

$\varepsilon_i$  Normalverzerrungen, dimensionslos,

$\gamma_{ij}$  Schubwinkel, dimensionslos,  $\gamma_{ji} = \gamma_{ij} \approx \tan \gamma_{ji}$  ( $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \gamma_{ij}$  Schubverzerrungen),

$\checkmark$  Symbol für die *Voigtsche* Notation von Spannungs- und Verzerrungstensor,

dann lässt sich das linear-elastische Stoffmodell nach *Hooke* in drei Dimensionen für den allgemeinen Fall eines orthotropen linear-elastischen Materialverhaltens durch Gleichung (3.6) angeben – hier unter der Vereinfachung formuliert, dass die drei Orthotropierichtungen den kartesischen Achsenrichtungen entsprechen (andernfalls werden die Tensoren  $\sigma_{eff}$  und  $\varepsilon_{lin}^m$  von *FLAC<sup>3D</sup>* entsprechend transformiert):

$$\varepsilon_{lin}^m = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_x} & -\frac{\nu_{yx}}{E_y} & -\frac{\nu_{zx}}{E_z} & & & \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & -\frac{\nu_{zy}}{E_z} & & & \\ -\frac{\nu_{xz}}{E_x} & -\frac{\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} & & & \\ & & & \frac{1}{G_{xy}} & & \\ & & & & \frac{1}{G_{xz}} & \\ & & & & & \frac{1}{G_{yz}} \end{bmatrix} \check{\sigma}_{eff} \quad (3.6)$$

mit (für  $i, j \in \{x; y; z\}$ ,  $i \neq j$ )

$E_i$  Elastizitäts- oder *Youngs*che Moduli in *MPa*,

$\nu_{ij}$  Querdehnungs- oder *Poisson*zahlen in  $j$ -Richtung bei Belastung in  $i$ -Richtung, dimensionslos,  $\nu_{ji} = \nu_{ij}$ ,

$G_{ij}$  Schubmoduli in *MPa*.

In Form von zwei weiteren Stoffmodellen sind die beiden Spezialfälle von Gleichung (3.6) für isotrope Elastizität und transversal isotrope Elastizität ebenfalls in *FLAC<sup>3D</sup>* implementiert.

Als stellvertretendes Beispiel für in *FLAC<sup>3D</sup>* implementierte elastoplastische Stoffmodelle kann das ebenfalls sehr verbreitete Stoffmodell nach *Mohr/Coulomb* genannt werden, *de Coulomb* (1776). Ein elastoplastisches Material zeigt ein linear-elastisches Spannungs-Verformungs-Verhalten, solange der Spannungszustand nicht ein materialabhängiges Beanspruchungsniveau erreicht bzw. überschreitet, das als Plastizitätsgrenze oder plastische Fließgrenze bezeichnet wird, d.h. solange der Zahlenwert der zugehörigen sogenannten Fließfunktion  $F^p$  für diesen



Beanspruchungszustand nicht positiv wird. Sobald die Fließgrenze lokal überschritten wird und sich somit in lokalen Bereichen der Tragstruktur Überspannungen aufbauen, deformiert sich das Material ideal-plastisch gemäß einer Potenzialfunktion  $Q^p$  derart, dass in Verbindung mit den plastischen Deformationen die Überspannungen durch Spannungsumlagerungen in benachbarte, noch nicht so hoch beanspruchte Tragwerksbereiche wieder abgebaut werden und  $F^p = 0 \text{ MPa}$  erhalten wird. Die Bereiche, in denen die Fließgrenzfestigkeit erreicht wird, werden als plastische Zonen bezeichnet. Im Fachgebiet der Gebirgsmechanik werden plastische Stoffmodelle auch verwendet, um „pseudoplastisches“ Materialverhalten (auch „Bruchfließen“ genannt) – also Bruchversagensvorgänge, die zu erhöhten Deformationen im zerbrochenen Gesteinsmaterial und zu Spannungsumlagerungen in umliegende Gebirgsbereiche führen, ohne dass konstruktiv bedingt die Bruchkörper aus dem Gebirgsverbund herausbrechen können (z.B. durch Anordnung eines Ausbaus) – zu modellieren. In den Versagensbereichen bleibt damit ein Resttragvermögen (Restfestigkeit) bestehen.

Für das Stoffmodell nach *Mohr/Coulomb* ergeben sich die (pseudo-)plastische Fließfunktion und die Potenzialfunktion im Hauptspannungsraum, d.h. in Termen von maximaler und minimaler Hauptspannung zu:

$$F^p(\sigma_1; \sigma_3) = N_\varphi^{-\frac{1}{2}} \sigma_1 - N_\varphi^{\frac{1}{2}} \sigma_3 - c \quad (3.7)$$

$$Q^p(\sigma_1; \sigma_3) = N_\psi^{-\frac{1}{2}} \sigma_1 - N_\psi^{\frac{1}{2}} \sigma_3 \quad (3.8)$$

mit

$F^p$  plastische Fließfunktion in  $\text{MPa}$ ,

$\sigma_1, \sigma_3$  maximale bzw. minimale Hauptspannung in  $\text{MPa}$ ,

$N_\varphi$  Reibungsfunktion, dimensionslos,  $N_\varphi = \frac{1+\sin\varphi}{1-\sin\varphi}$ ,

$\varphi$  Winkel der inneren Reibung des Materials in  $^\circ$ ,

$c$  Kohäsion des Materials in  $\text{MPa}$ ,

$Q^p$  Potenzialfunktion in  $\text{MPa}$ ,

$N_\psi$  Dilatanzfunktion, dimensionslos,  $N_\psi = \frac{1+\sin\psi}{1-\sin\psi}$ ,

$\psi$  Dilatanzwinkel des Materials in  $^\circ$ .

Die Richtung der plastischen Deformationen im Hauptspannungsraum wird bei diesem Ansatz durch den Gradienten von  $Q^p$  bestimmt. Durch Multiplikation der Gleichungen (3.7) und (3.8)

mit Konstanten können dabei mit Blick auf die Ziele Vorzeichenwechselfassung bzw. Deformationsrichtungsbestimmung äquivalente Formulierungen für  $F^p$  und  $Q^p$  erhalten werden, so z.B. mit dem Faktor  $N_\varphi^{1/2}$  in *Itasca (2012)*.

Das in FLAC<sup>3D</sup> enthaltene Stoffmodell „*Mohr/Coulomb*“ enthält überdies neben der *Coulomb*-schen Schergeraden als plastischer Beanspruchungsgrenze eine Zugfestigkeitsgrenze, bei deren Überschreitung durch  $\sigma_3$  ein Zugversagen des Materials erfolgt. Des Weiteren existiert in FLAC<sup>3D</sup> mit „ubiquitous joint“ (= allgegenwärtige Klüftung) auch ein elastoplastisches Stoffmodell für geschichtete Materialien wie z.B. Tonstein, bei dem neben dem bereits beschriebenen Prozess zur Ermittlung und rechnerischen Handhabung von (pseudo-)plastischem Matrixversagen auch ein Schichtflächenversagen nach dem Stoffmodell von *Mohr/Coulomb* mit speziell für die Schichtflächen gültigen Materialparametern  $c^s$ ,  $\varphi^s$  und  $\psi^s$  festgestellt und in seinen Auswirkungen beschrieben werden kann. Eine analoge Formulierung der Fließfunktion  $F^{ps}$  und der Potenzialfunktion  $Q^{ps}$  für das Schichtflächenversagen erfolgt hierbei in Termen von Normalspannung  $\sigma_n^s$  und Schubspannung  $\tau^s$  in Bezug auf die Schichtungsebene anstelle von  $\sigma_1$  und  $\sigma_3$ . Für die Bewertung sowohl der Matrix- wie auch der Schichtflächentragfähigkeit werden im Stoffmodell „ubiquitous joint“ ebenfalls auch Zugfestigkeitsgrenzen für  $\sigma_3$  bzw.  $\sigma_n^s$  herangezogen.

Weitere in FLAC<sup>3D</sup> implementierte Stoffmodelle mit plastischen Anteilen sind beispielsweise *Drucker/Prager* (*Drucker & Prager, 1952*), *Mohr/Coulomb* und „ubiquitous joint“ mit Dehnungsverfestigung, ein modifiziertes *Cam-Clay*-Modell (*Roscoe & Burland, 1968*) sowie das Stoffmodell „*Hoek/Brown*“, welches auf dem empirischen Versagenskriterium nach *Hoek/Brown* und seiner Verallgemeinerung (*Hoek & Brown, 1980, 1997*) basiert.

Ein gängiges Beispiel für zeitabhängige Stoffmodelle, die ein viskoses Materialverhalten beinhalten, ist das viskose Stoffmodell nach *Norton (1929)*, welches ursprünglich für metallische Werkstoffe entwickelt worden ist, aber auch im Bereich der Gebirgsmechanik (Salzmechanik) vielfach Anwendung findet. Die viskose Verzerrungsrate wird im Stoffmodell nach *Norton* skalar durch den Potenzansatz  $\dot{\epsilon}_{eq}^v(\sigma_{eff}) = A \{\sigma_{eq}\}^n$  in Abhängigkeit von der Vergleichsspannung  $\sigma_{eq}$  definiert, welcher für drei Raumdimensionen wie folgt erweitert werden kann:



$$\varepsilon^v(\sigma_{eff}) = \frac{3}{2} A \{\sigma_{eq}\}^{n-1} \{s\} \quad (3.9)$$

mit

$\varepsilon^v$  viskoser Verzerrungstensor, dimensionslos,

$\varepsilon_{eq}$  effektive Verzerrung, dimensionslos,  $\varepsilon_{eq} = \sqrt{2/3 (e \cdot e)}$ ,

$e$  deviatorischer Verzerrungstensor, dimensionslos,  $e = \varepsilon - \bar{\varepsilon}I$  mit  $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z)/3$ ,

$A, n$  Stoffmodellparameter des Materials in  $s^{-1}$  bzw. dimensionslos,

$\sigma_{eq}$  Vergleichsspannung nach *von Mises* in  $MPa$ ,  $\sigma_{eq} = \sqrt{3/2 (s \cdot s)}$ ,

$s$  deviatorischer Spannungstensor in  $MPa$ ,  $s = \sigma - \bar{\sigma}I$  mit  $\bar{\sigma} = (\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)/3$ ,

$\{\dots\}$  Maßzahl einer Größe (Zahlenwert ohne die angegebene Einheit).

In FLAC<sup>3D</sup> ist weiterhin unter der Bezeichnung „two-component power law“ eine Verallgemeinerung des Stoffmodells nach *Norton* implementiert, bei der sich die Kriechverzerrungsrate additiv aus zwei *Norton*-Termen gemäß Gleichung (3.9) mit den Materialparametern  $A_1, n_1$  bzw.  $A_2, n_2$  zusammensetzt, die für unterschiedliche Vergleichsspannungsbereiche aktiv oder inaktiv sein können.

Weitere in FLAC<sup>3D</sup> implementierte Stoffmodelle mit viskosen Anteilen sind beispielsweise die Stoffmodelle nach *Maxwell* (*Maxwell, 1868*) und nach *Burgers* (*Burgers, 1935*) sowie das von der TUC entwickelte und hinzugefügte benutzerdefinierte Stoffmodell *Lux/Wolters* (*Wolters, 2014; Lerche, 2012*), in das die Stoffmodelle *Lubby2* bzw. *modLubby2* integriert sind.

Insgesamt verfügt der Simulator FLAC<sup>3D</sup> über eine breitgefächerte Auswahl an mechanischen Stoffmodellen sowie der Option, weitere Stoffmodelle über die integrierte Benutzerschnittstelle nachzuimplementieren. Mit Blick auf das BenVaSim-Projekt bietet diese umfangreiche Stoffmodellauswahl somit eine große Flexibilität bei der Zusammenstellung von Berechnungsvariationen für die am Projekt beteiligten Simulatoren und stellt daher eine gute Grundvoraussetzung für das Benchmarking dar.

### 3.2.3 Zum Simulator TOUGH2 für geothermohydraulische Aufgabenstellungen

Die in diesem Bericht angegebenen Informationen über das Programm TOUGH2 (Transport of Unsaturated Groundwater and Heat, Version 2) und seine Funktionsweise stammen, wenn nicht anders angegeben, aus dem Benutzerhandbuch *Pruess et al. (1999/2012)*, aus *Rutqvist et al.*



(2002) sowie aus dem Fortran-Quellcode von TOUGH2. Beim BenVaSim-Projektpartner TUC besteht derzeit Zugriff auf den Quellcode zur Version 2.0 von TOUGH2.

### *Eigenschaften und Simulationsprozess von TOUGH2*

Das grundlegende Programm TOUGH2, auf dem die modernen, primär thermohydraulischen Simulatoren der TOUGH-Familie basieren, ist modular aufgebaut, und je nach Wahl des Moduls bzw. einer mit einem externen Simulator gekoppelten Version von TOUGH2 können dabei auch C/M-Prozesse in die Simulation eingebunden werden. TOUGH2 ist eine Weiterentwicklung des in der Programmiersprache Fortran verfassten Simulators TOUGH aus den Achtzigerjahren des vorangegangenen Jahrhunderts. Seine Ein- und Ausgabe basieren auf Ein- und Ausgangsdateien im ASCII-Format (Textdateien) in Anlehnung an Dateneingaben mittels Lochkarten (vgl. auch Termini wie „input deck“ und „cards“ in *Pruess, 1987*). Aufgrund dieser Historie besitzt TOUGH2 keine grafische Benutzeroberfläche, sondern liegt nach Kompilierung des Quellcodes in Form einer ausführbaren Datei vor, welche lediglich Eingangsdateien im Textformat einliest, die Berechnung durchführt und die Resultate – ggf. mit Fehlermeldungen, falls Eingabefehler vom Benutzer oder numerische Instabilitäten vorliegen oder Abbruchkriterien erfüllt sind – in Ausgangsdateien im Textformat speichert. Mithilfe der zentralen Eingangsdatei sind auch Steuerungen des Simulationsprozesses möglich, z.B. hinsichtlich der Konvergenzkriterien oder der Ausgabe von detaillierteren Informationen zur Berechnung. Für die Ein- und Ausgangsdateien existiert jedoch kein integrierter Prä- bzw. Postprozessor; die Daten sind manuell oder mithilfe von separaten Programmen zu erstellen bzw. auszuwerten.

Die zentralen Fähigkeiten von TOUGH2 sind

- die Simulation von hydraulischen Strömungsprozessen unter Berücksichtigung von Zwei- oder Mehrphasenfluss mit zwei oder mehr Komponenten, die generell in allen vorhandenen Phasen auftreten können (diese Eigenschaft kann in einzelnen Modulen eingeschränkt sein, z.B. bei weder wasserlöslichem noch flüchtigem Schweröl, das im EOS-Modul 8 nur in seiner eigenen Phase auftreten kann), sowie
- die Simulation von konvektiven, sättigungsabhängig-konduktiven und radiativen Wärmeausbreitungsprozessen.

Die Beziehungen zwischen den zentralen hydraulischen Größen Porendrucke, Sättigungen (jeweils phasenbezogen,  $\varphi$ ) und Massengehalte jeder Zone (komponentenbezogen,  $\kappa$ ) werden im



Simulator TOUGH2 durch die Differenzialgleichungen (3.10) (Massenbilanzgleichung) und (3.11) (in Termen der Fluidmassen umgerechnete *Darcy*-Strömungsgleichung und *Fick*-Diffusionsgleichung) sowie durch Gleichung (3.12) (Definition der Massengehalte) beschrieben:

$$-\sum_{\varphi} \nabla \cdot q_{m;\kappa\varphi} + \hat{q}_{m;\kappa} = \zeta_{m/V;\kappa} \quad (3.10)$$

$$q_{m;\kappa\varphi} = -\rho_{\varphi} X_{\kappa\varphi} \cdot K_{rel;\varphi}(S_l) \cdot \frac{K}{\eta_{\varphi}} \cdot \nabla(p_{\varphi} + \gamma_{\varphi} z) - \rho_{\varphi} D_{\varphi} \cdot \nabla X_{\kappa\varphi} \quad (3.11)$$

$$\zeta_{m/V;\kappa} = \phi \sum_{\varphi} S_{\varphi} \rho_{\varphi} X_{\kappa\varphi} \quad (3.12)$$

mit

$q_{m;\kappa\varphi}$  Massenstromdichte in  $kg/m^2 s$ ,

$\hat{q}_{m;\kappa}$  Massenzufuhr rate (Quellstärke) in beiden Phasen in  $kg/m^3 s$ ,

$\zeta_{m/V;\kappa}$  Massengehalt (Masse pro  $m^3$  Medium) in beiden Phasen in  $kg/m^3$ ,

$\rho_{\varphi}$  Massendichte in  $kg/m^3$ ,

$X_{\kappa\varphi}$  Massenanteil der Komponente  $\kappa$  an der Phase  $\varphi$ , dimensionslos ( $kg/kg$ ),

$K_{rel;\varphi}$  relative Permeabilität, dimensionslos,

$S_{\varphi}$  Sättigung, dimensionslos ( $m^3/m^3$ ),

$K$  intrinsische Permeabilität des Mediums in  $m^2$ ,

$\eta_{\varphi}$  dynamische Viskosität in  $MPa \cdot s$ ,

$p_{\varphi}$  Porendruck in  $MPa$ ,

$\gamma_{\varphi}$  Wichte in  $MN/m^3 = MPa/m$ ,

$z$  vertikale Koordinate (negativer Teufenwert) in  $m$ ,

$\phi$  Porosität des Mediums, dimensionslos,

$D_{\varphi}$  effektiver molekularer Diffusionskoeffizient in  $m^2/s$ , abhängig u.a. von  $S_{\varphi}$  und  $\phi$

(nach *Pruess et al., 1999/2012*; Terminologie nach *Rutqvist et al., 2002*),

unter Berücksichtigung der modellierungstechnischen Nebenbedingungen für die Porendrucke, Sättigungen und Fluidmassenanteile der unterschiedlichen Phasen bzw. Komponenten (Kapillardruck sowie  $\sum_{\varphi} S_{\varphi} = 1 = \sum_{\kappa} X_{\kappa\varphi}$ ). Zur Beschreibung der thermischen Prozesse werden in TOUGH2 die Differenzialgleichung (3.13) (Wärmeenergiebilanzgleichung) sowie die Gleichungen (3.14) (Definition des Wärmeenergiegehaltes) und (3.15) (Transportgleichungen) ver-



wendet, die Temperaturen und Wärmeenergiegehalte zueinander in Beziehung setzen. Der Wärmetransport findet dabei über Wärmeströmung/Konvektion nach Gleichung (3.15d) statt und kann zudem optional über Wärmeleitung nach Gleichung (3.15c) (*Fourier-Gesetz*) sowie Wärmestrahlung nach Gleichung (3.15b) (*Stefan/Boltzmann-Gesetz*) in TOUGH2 erfolgen:

$$-\nabla \cdot q_E + \hat{q}_E = \dot{\zeta}_{E/V} \quad (3.13)$$

$$\dot{\zeta}_{E/V} = (1 - \phi)\rho_s \dot{h}_s + \phi \sum_{\varphi} S_{\varphi} \rho_{\varphi} \dot{h}_{\varphi} \quad (3.14a)$$

$$\dot{h}_s = \dot{\zeta}_{E/m;s} = c_s \dot{T} \quad (3.14b)$$

$$q_E = q_E^{conv} + q_E^{cond} + q_E^{rad} \quad \text{mit} \quad (3.15a)$$

$$q_E^{rad} = e \sigma_{SB} (T_2^4 - T_1^4) \quad (3.15b)$$

$$q_E^{cond} = -\lambda \nabla T \quad (3.15c)$$

$$q_E^{conv} = \sum_{\varphi} \left( h_{\varphi} \sum_{\kappa} q_{m;\kappa\varphi} \right) \quad (3.15d)$$

mit

$q_E$  Wärmeenergiestromdichte in  $J/m^2s$  (beinhaltet alle Wärmetransportprozesse),

$\hat{q}_E$  Wärmeenergiequellstärke in  $J/m^3s$ ,

$\zeta_{E/V}$  Wärmeenergiegehalt (Wärmeenergie pro  $m^3$  Medium) in  $J/m^3$ ,

$\zeta_{E/m;s}$  spezifische Wärmeenergie der Festphase in  $J/kg$ ,

$c_s$  spezifische isobare Wärmekapazität der Festphase in  $J/(kg \cdot K)$ ,

$T$  Temperatur in  $K$ ,

$q_E^{conv}$  Wärmeenergiestromdichte durch Wärmeströmung in  $W/m^2 = J/m^2s$ ,

$q_E^{cond}$  Wärmeenergiestromdichte durch Wärmeleitung in  $W/m^2$ ,

$q_E^{rad}$  Wärmeenergiestromdichte durch Wärmestrahlung in  $W/m^2$ ,

$e$  Emissionsgrad für Wärmestrahlung, dimensionslos,  $e \in [0; 1]$  ( $e = 1$ : „schwarzer Körper“),

$\sigma_{SB}$  Stefan/Boltzmann-Konstante in  $W/m^2K^4$ ,  $\sigma_{SB} = 5,67 \cdot 10^{-8} W/m^2K^4$ ,

$\lambda$  Wärmeleitfähigkeit in  $W/(m \cdot K)$ ,

$h_{\varphi}$  spezifische Enthalpie in  $J/kg$ .



Die eigentlich zu betrachtende Erhaltungsgröße der inneren Energie umfasst neben der Wärmeenergie (Enthalpie) auch noch die Volumenarbeit, welche allerdings bei den sehr geringen Deformationsgeschwindigkeiten von geologischen Formationen als zahlenmäßig untergeordnet angesehen und daher vernachlässigt werden kann.

Die auftretenden Gleichungen (3.10) bis (3.15) werden dabei in einer integralen Form über eine implizite Integrale Finite-Differenzen-Methode (IFDM) simultan-iterativ gelöst. Hierzu werden die Gleichungen in jedem Zeitschritt in ein nichtlineares Gleichungssystem der Form  $F(X) = 0$  in Abhängigkeit des thermodynamischen Zustands  $X$  überführt und dieses dann iterativ mit dem *Newton*-Verfahren (auch *Newton-Raphson*-Verfahren genannt) nach  $X$  gelöst. Die Anwendung eines impliziten Verfahrens hat zur Folge, dass es bei der Simulation im zeitlichen Berechnungsverlauf nicht zu Instabilitäten hinsichtlich des thermodynamischen Zustands kommt (keine Divergenz der Zeitreihenwerte) – Instabilitäten im Rahmen des *Newton*-Verfahrens bei der Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems sind gleichwohl möglich (Divergenz des Verfahrens oder des in ihm enthaltenen linearen Gleichungslösers).

Unterschiedliche Modellierungen von TH-Prozessen sind über die unterschiedlichen EOS-Module („equations of state“) von TOUGH2 realisierbar. Mit der Wahl eines EOS-Moduls werden die von TOUGH2 zu lösenden physikalischen Gleichungen indirekt durch Bestimmung der verwendeten Phasen (flüssig, gasförmig, flüssig-hydrophob etc.), Komponenten (Wasser, Luft, Radionuklide etc.) und Prozesse (T/H/C) sowie die Fluidkennwerte und ihre Abhängigkeiten vom thermodynamischen Zustand festgelegt. Hervorzuheben sind mit Blick auf das Benchmarking-Projekt die folgenden beiden Module:

- primär: EOS3 – Zweiphasenflussprozesse (Flüssig- und Gasphase,  $\varphi \in \{l; g\}$ ) mit den Komponenten Wasser und Luft ( $\kappa \in \{w; a\}$ ), sowie
- sekundär: EOS9 – Einphasenflussprozesse: Die Gasphase wird auch im Fall der Vollsättigung als unendlich permeabel angenommen, so dass der Gasdruck stets ausbalanciert ist und die entsprechenden Strömungs- und Bilanzgleichungen für  $\varphi = g$  bzw.  $\kappa = a$  wegfallen. Anstelle der Gleichungen (3.10) bis (3.12) wird hier zur Strömungsberechnung für die Flüssigphase die *Richards*-Gleichung (3.16) angesetzt, die sich aus den Gleichungen (3.10) bis (3.12) durch Einsetzen ergibt:

$$\frac{d}{dt}(\phi S_l \rho_l) = \nabla \cdot \left( \rho_l \cdot K_{rel,l}(S_l) \cdot \frac{K}{\eta_l} \cdot \nabla(p_l + \gamma_l z) \right) + \hat{q}_{m,w} \quad (3.16)$$



Andere Zweiphasenflussphänomene wie Kapillardruck oder Relativpermeabilitäten bleiben dabei aber bestehen.

Das Modul EOS9 wird im Rahmen des BenVaSim-Projekts nur für Vergleiche mit analytischen Lösungen bei einfachen Modellgeometrien herangezogen werden und damit lediglich eine untergeordnete Bedeutung haben.

### *Kapillardruck- und Relativpermeabilitätsfunktionen in TOUGH2*

Bei Ansatz von Flüssig- und Gasphase (EOS-Modul 3) treten an den Kontaktflächen zwischen diesen beiden Phasen sowie an den Oberflächen des Korngerüsts physikalische Wechselwirkungen auf, die in der Ausbildung eines sättigungsabhängigen Differenzdrucks zwischen den Drücken beider Phasen resultieren (Kapillardruck,  $p_{cap}(S_l) = p_g - p_l \geq 0 \text{ MPa}$ ). Des Weiteren führt die Aufteilung des insgesamt verfügbaren Raumes der Gesteinsporen auf Flüssig- und Gasphase zu einer verminderten hydraulischen Leitfähigkeit des Gesteins für jede dieser Phasen (relative Permeabilität  $K_{rel;\varphi}(S_l) \in [0; 1]$  im Verhältnis zur absoluten, fluidunabhängigen Permeabilität  $K$ ).

Für die Abhängigkeiten der Größen  $p_{cap}$  und  $K_{rel;\varphi}$  von der Flüssigkeitssättigung sind in der einschlägigen Literatur auf unterschiedliche Weise Formeln ermittelt worden. Zu den am weitesten verbreiteten Beziehungen zählen dabei für den Kapillardruck die Gleichung (3.17) nach *van Genuchten* (*van Genuchten, 1980*) und die Gleichung (3.18) nach *Brooks/Corey* (*Corey, 1954; Brooks & Corey, 1964*):

$$p_{cap}(S_l) = \frac{\gamma_l}{\tilde{\alpha}} \left( S_l^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{1-m} \quad (3.17)$$

$$p_{cap}(S_l) = p_b S_l^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (3.18)$$

mit

$\tilde{\alpha}$  Formparameter für den Ansatz nach *van Genuchten* in  $m^{-1}$ ,

$m, n$  Formparameter für den Ansatz nach *van Genuchten*, dimensionslos,

$p_b$  Blasenbildungsdruck für den Ansatz nach *Brooks/Corey* in  $\text{MPa}$ ,

$\lambda$  Porengrößenverteilungsindex für den Ansatz nach *Brooks/Corey*, dimensionslos.



Zusammen mit kapillardruckabhängigen Formulierungen für Relativpermeabilitätsfunktionen aus *Mualem (1976)* und *Burdine (1953)* sind aus den beiden Gleichungen (3.17) und (3.18) dann die in den folgenden Gleichungen (3.19) bzw. (3.20) wiedergegebenen Ansätze für Relativpermeabilitäten nach *Mualem/van Genuchten* bzw. *Burdine/Brooks/Corey* entwickelt worden:

$$K_{rel;l}(S_l) = S_l^{\tilde{\varepsilon}} \left( 1 - \left( 1 - S_l^{\frac{1}{m}} \right)^m \right)^2, \quad K_{rel;g}(S_l) = (1 - S_l)^{\tilde{\gamma}} \left( 1 - S_l^{\frac{1}{m}} \right)^{2m} \quad (3.19)$$

$$K_{rel;l}(S_l) = S_l^{\frac{2+3\lambda}{\lambda}}, \quad K_{rel;g}(S_l) = (1 - S_l)^2 \left( 1 - S_l^{\frac{2+\lambda}{\lambda}} \right) \quad (3.20)$$

mit

$\tilde{\varepsilon}$  Porenverbundenheitsparameter der Flüssigphase für den Ansatz nach *Mualem*, dim'los,

$\tilde{\gamma}$  Porenverbundenheitsparameter der Gasphase für den Ansatz nach *Mualem*, dim'los.

TOUGH2 verfügt für die hydraulische Modellierung u.a. über den Kapillardruckansatz nach *van Genuchten*, Gleichung (3.17), über den Relativpermeabilitätsansatz nach *Burdine/Corey*, Gleichung (3.20) mit  $\lambda = 2$  fixiert, sowie über den Relativpermeabilitätsansatz für die Flüssigphase nach *Mualem/van Genuchten*, Gleichung (3.19) für  $\varphi = l$  und mit  $\tilde{\varepsilon} = 1/2$  fixiert, in Verbindung mit dem Relativpermeabilitätsansatz für die Gasphase nach *Burdine/Corey*. Die uneingeschränkten Formulierungen nach den Gleichungen (3.17) bis (3.20) können allerdings bei Vorlage des Fortran-Quellcodes von TOUGH2 auf einfache Weise nachimplementiert werden und sind in den FTK-Simulator des Projektpartners TUC auf diese Weise bereits integriert worden. Des Weiteren sind in TOUGH2 auch simplere Kapillardruck-Sättigungs- bzw. Relativpermeabilitäts-Sättigungs-Beziehungen wie lineare Funktionen oder  $p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}$  bzw.  $K_{rel;\varphi} \equiv 1$  und  $K_{rel;\varphi} = S_\varphi$  einstellbar.

### Phasenfremde Komponenten

Zur Berücksichtigung jeweilig wechselseitig „phasenfremder“ Komponenten bei der Zweiphasenströmung, d.h. von Wasserdampf in der Gasphase und von gelöster Luft in der Flüssigphase, wird angenommen, dass die entsprechenden Phasenübergangsprozesse (Lösung von Luftmolekülen in der Flüssigphase bzw. Kondensierung von Wasserdampf aus der Gasphase) in sehr viel kürzeren Zeiträumen ablaufen als die zentralen modellierten TH<sup>2</sup>M-Prozesse wie Fluid-

oder Wärmeenergie-transport. Für die phasenfremden Komponenten zu beiden Phasen wird in TOUGH2 daher angenommen, dass sie sich stets in ihren jeweiligen physikalisch-chemischen Gleichgewichten befinden. Die in TOUGH2 verwendeten Gleichgewichtsbeziehungen sind dabei eine Gleichung nach *IFC (1967)* in der Implementierung von *M.J. O'Sullivan* zur Berechnung des Flüssigkeitsdampf-Partialdrucks (auch kurz „Dampfdruck“ genannt) in der Gasphase im gesättigten Zustand sowie das *Henry'sche Gesetz* zur Berechnung des Stoffmengenanteils der gelösten Luft in der Flüssigphase. Beide Gleichungen sind hier für die Komponenten Wasser und Luft formuliert:

$$p_{wg}(T) = p_{wg;0} \cdot e^{\frac{\sum_{i=1}^5 \alpha_i \bar{T}^i}{T^*(1+\alpha_6 \bar{T} + \alpha_7 \bar{T}^2)} - \frac{\bar{T}}{\alpha_8 + \alpha_9 \bar{T}^2}} \quad (3.21)$$

$$x_{al}(p_g; T) = \frac{1}{H_{aw}} p_{ag} \quad (3.22)$$

mit

$p_{\kappa g}$  Partialdruck der Komponente  $\kappa$  in der Gasphase in *MPa*,  $p_g = \sum_{\kappa} p_{\kappa g}$ ,

$T_w^{crit}$  kritische Temperatur von Wasser in *K*,  $T_w^{crit} = 647,3 \text{ K}$ ,

$$T^* = T/T_w^{crit}, \quad \bar{T} = 1 - T^*,$$

$p_{wg;0}$  Wasserdampf-Partialdruck für  $T = T_w^{crit}$  in *MPa*,

$\alpha_i$  Konstanten für die Beziehung nach *IFC (1967)* ( $i \in \{1; \dots; 9\}$ ), dimensionslos,

$x_{\kappa \varphi}$  Stoffmengenanteil der Komponente  $\kappa$  an der Phase  $\varphi$ , dimensionslos (*mol/mol*),

$H_{aw}$  Henry-Koeffizient für die Lösung von Luft in Wasser in *MPa*.

### 3.2.4 Der FTK-Simulator in der bis dato bestehenden Version 2

Im Rahmen des BMWi-Forschungsvorhabens mit dem Förderkennzeichen 02E11041 ist vom Projektpartner TUC eine Kopplung der Simulatoren *FLAC<sup>3D</sup>* und *TOUGH2* zum THM-gekoppelten FTK-Simulator (FLAC<sup>3D</sup>-TOUGH2-Kopplungs-Simulator) durchgeführt worden, dessen Funktionalitäten im Abschlussbericht *Lux et al. (2015)* des Vorhabens detailliert erläutert sind. Die Motivation für die Entwicklung des FTK-Simulators bestand darin, einen möglichst effektiven Simulator zur rechnerischen Simulation von TH<sup>2</sup>M-gekoppelten Prozessen zur Verfügung zu haben und dabei auf etablierten Simulatoren – ausgehend vom auch bereits bei der TUC bewährten Simulator *FLAC<sup>3D</sup>* – aufzubauen. Dabei ist zunächst eine Kopplung auf hy-



draulischer Seite mit dem Einphasenflussmodul EOS9 von TOUGH2 erfolgt. Erste Verifizierungen des auf diese Weise erhaltenen FTK-Simulators in der Version 1 zu einphasig-HM-gekoppelten ( $H^1M$ ) Modellbeispielen sind im vorstehend genannten Bericht zu finden. Im weiteren Verlauf des Forschungsvorhabens 02E11041 wurden dann auch die Zweiphasenflussmodule EOS3 und EOS5 (Komponenten Wasser und Wasserstoff) von TOUGH2 in den FTK-Simulator integriert ( $\rightarrow$  Version 2). Die Versionsnummern sind dabei retroaktiv vergeben worden; eine feinere Unterteilung der Bezeichnung hinsichtlich der Charakterisierung von bedeutungsvolleren Schritten in der Weiterentwicklung innerhalb einer Version ist daher bislang nicht erfolgt.

Erstmalig intensiv eingesetzt worden ist der FTK-Simulator im Rahmen des interdisziplinären Projekts „ENTRIA“ (Entsorgungsoptionen für radioaktive Reststoffe: Interdisziplinäre Analysen und Entwicklung von Bewertungsgrundlagen), dessen Ziel es ist, basierend auf naturwissenschaftlich-technischen, sozialwissenschaftlichen und rechtswissenschaftlichen Aspekten und Untersuchungen Grundlagen zur Bewertung und zum Vergleich der derzeit möglichen Optionen für eine Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland zu erarbeiten. Vonseiten des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik ist im Projekt ENTRIA das thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Systemverhalten eines generischen Endlagerbergwerks in einer Vielzahl von Variationen im Tonstein- und auch im Salinargebirge mit dem FTK-Simulator analysiert worden, *Lux et al. (2018)*. Die in diesem Projekt erfolgten Verifizierungsmaßnahmen und Weiterentwicklungen am FTK-Simulator sowohl funktioneller wie auch visualisierender Art sind ebenfalls im genannten Bericht sowie z.B. in *Lux et al. (2017)* und in *Blanco Martín et al. (2016)* (Vergleichsberechnungen zum TSDE-Experiment/Asse) dokumentiert. Die (übergeordnete) Versionsnummer 2 des FTK-Simulators ist durch die Weiterentwicklungen nicht geändert worden.

### *Aufbau, Simulationsprozess und Eigenschaften des FTK-Simulators 2*

Eine Maxime bei der Programmierung des FTK-Simulators ist die Verwendung des geomechanischen Simulators FLAC<sup>3D</sup> als Mastercode gewesen, aus dem heraus die thermohydraulischen Simulationen mit TOUGH2 gesteuert werden. Der zum Zeitpunkt der Entwicklung des FTK-Simulators bereits bestehende und bewährte TOUGH-FLAC-Simulator des Benchmarking-Projektpartners LBNL verwendet im Gegensatz dazu TOUGH2 als Mastercode und nutzt die Geomechanik auf einer der Geohydraulik zuarbeitenden Weise (siehe dazu Abschnitt 3.2.5).

Im Sinne der Verwendung von  $FLAC^{3D}$  als Mastercode des FTK-Simulators wurde bei der Programmierung grundsätzlich auch das Ziel verfolgt, die durch TOUGH2 zusätzlich erforderlichen Modellierungseingaben für den  $FLAC^{3D}$ -Benutzer auf möglichst „ $FLAC^{3D}$ -artige“ Weise zu realisieren und auf diese Weise von TOUGH2 zu abstrahieren. Das für eine FTK-Simulation zu erstellende Anwenderprogramm wird daher im Wesentlichen wie im Fall einer ungekoppelten  $FLAC^{3D}$ -Simulation mit  $FLAC^{3D}$ -Kommandos und FISH-Funktionen verfasst; die für die Prozess- und Simulatorkopplung erforderlichen Initialisierungen und programmtechnischen Vorgänge sind dementsprechend ebenfalls über FISH-Variablen und FISH-Funktionen („FTK-Funktionen“) realisiert worden.

Bild 3.2 zeigt eine grobe strukturelle Veranschaulichung der Funktionsweise des FTK-Simulators mit den wesentlichen Teilschritten, die – gesteuert durch das Anwenderprogramm – im FTK-Simulator vor, während und nach der Geosystemsimulation ablaufen. Die von TOUGH2 benötigten Eingangs-Textdateien werden vor jedem TOUGH2-Aufruf von den FTK-Funktionen automatisch entsprechend der Benutzereingaben in  $FLAC^{3D}$  und ggf. weiteren Dateien erstellt, und die Ausgangs-Textdateien mit den Resultaten der TH-Teilsimulation werden nach dem Aufruf in  $FLAC^{3D}$  eingelesen. Dabei können die Ausgangsdateien aus TOUGH2 neben den primären Zustandsvariablen im Endzustand der TH-Teilsimulation auch Zeitreihenwerte von thermohydraulischen Größen und – nach Adaptionen der TUC im Fortran-Quellcode von TOUGH2 – eine Aufsummierung von über vorab vom Benutzer festgelegte Zonengrenzen

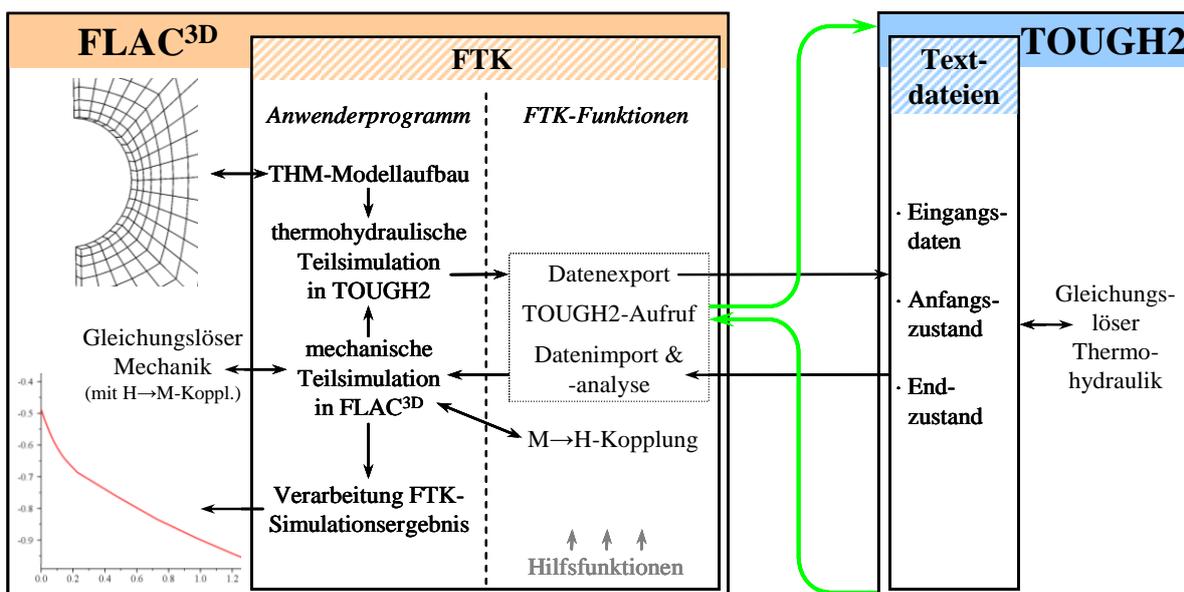


Bild 3.2: Grobe strukturelle Veranschaulichung der Funktionsweise des FTK-Simulators

transportierte Fluidmassen umfassen ( $\rightarrow$  Quantifizierung von Fluidbewegungen über eine reale oder gedachte Grenzlinie im geometrischen Modell wie z.B. über eine Streckenkontur). Durch Modifikationen im Rahmen des ENTRIA-Projekts können zudem sekundäre Zustandsvariablen aus TOUGH2 wie z.B. Massendichten, Relativpermeabilitäten oder spezifische Enthalpien der beiden fluiden Phasen in FLAC<sup>3D</sup> angezeigt sowie auch Strömungsgeschwindigkeiten aus TOUGH2 in FLAC<sup>3D</sup> als Vektorfelder visualisiert werden.

Als Nebeneffekt der Abstrahierung von TOUGH2 kann FLAC<sup>3D</sup> auch über den FTK-Simulator als Prä- und Postprozessor für TOUGH2 eingesetzt werden, d.h. eine ungekoppelte TOUGH2-Simulation kann aus FLAC<sup>3D</sup> heraus mit den softwareseitigen Werkzeugen für die Modellerstellung und -diskretisierung vorbereitet sowie mit den Ergebnisvisualisierungsmöglichkeiten von FLAC<sup>3D</sup> ausgewertet werden.

Eine Kopplung der beiden Simulatoren FLAC<sup>3D</sup> und TOUGH2 kann nur sequenziell erfolgen, d.h. die geomechanische und die thermohydraulische Teilsimulation finden im Wechsel miteinander statt. Insbesondere bleibt dabei nach jedem mechanischen bzw. thermohydraulischen Berechnungsschritt ein Verfahrensfehler, also eine verfahrensbedingte Diskrepanz zur exakten

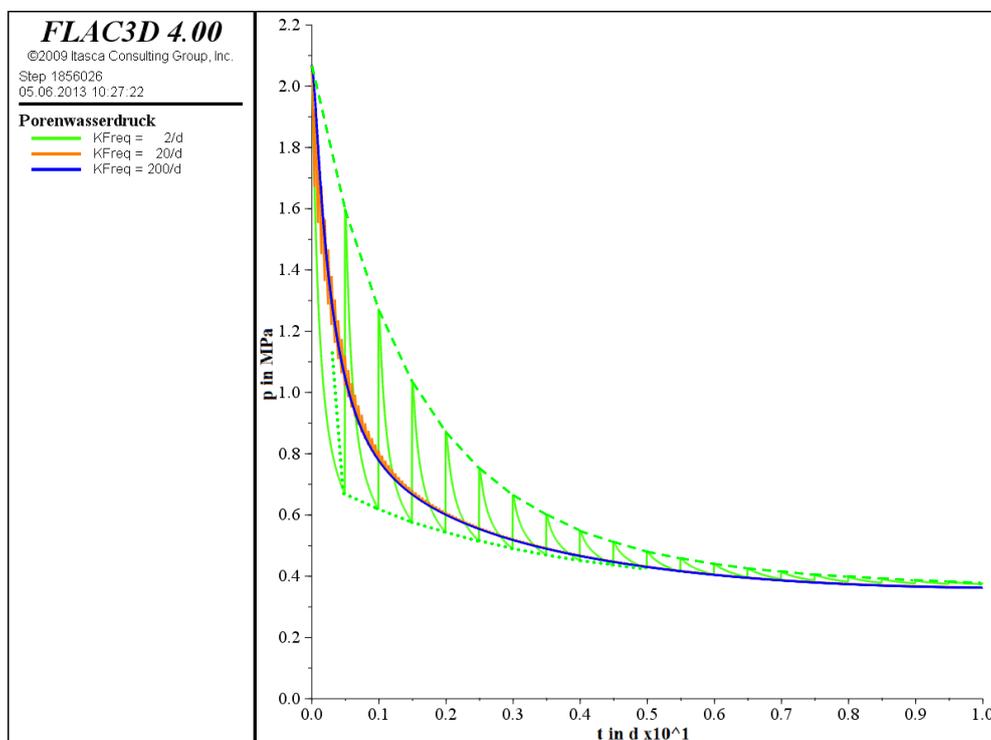


Bild 3.3: Porenwasserdruckabbau im Verlauf der Zeit für drei verschiedene Kopplungsfrequenzen sowie Hilfslinien (gestrichelt, gepunktet) für den grünen Graphen, Lux et al. (2015)

Lösung des Differenzialgleichungssystems, bestehen, der aber idealerweise im Verlauf der Zeit gegen 0 konvergiert. Der gemeinsame Zeitschritt für die beiden Teilsimulationen und damit die Häufigkeit der TOUGH2-Aufrufe aus FLAC<sup>3D</sup> pro simulierter Zeit („Kopplungsfrequenz“) ist vom Anwender in geeigneter Weise zu bestimmen. Je höher die Kopplungsfrequenz ist, desto geringer wird zwar der Verfahrensfehler gehalten, desto größer kann aber auch der Einfluss von sich akkumulierenden Rundungsfehlern werden und desto länger ist auch die Dauer der gekoppelten Simulation. Hingegen verfälschen zu große Zeitschritte das Berechnungsergebnis insbesondere hinsichtlich des zeitlichen Verlaufs der hydromechanischen Zustandsgrößen und können überdies zu numerischer Divergenz des gekoppelten Simulators führen. Bild 3.3 veranschaulicht den Einfluss der Kopplungsfrequenz auf Berechnungsergebnisse.

Die Kopplung der thermisch-hydraulischen Prozesse mit den mechanischen Prozessen (TH↔M) erfolgt im FTK-Simulator über die bereits in FLAC<sup>3D</sup> verwendeten Gleichungen (3.23) bis (3.25), z.T. in leicht verallgemeinerter Form, wobei eine M→T-Kopplung als untergeordnet angesehen und daher vernachlässigt wird:

$$H \rightarrow M: \quad \sigma_{eff} = \sigma_{tot} - \alpha p l \quad (3.23)$$

$$T \rightarrow M: \quad \dot{\varepsilon}^{th} = -\alpha_{th} \dot{T} l \quad (3.24)$$

$$M \rightarrow H: \quad \frac{1}{\tilde{M}_\varphi} \dot{p}_\varphi + \frac{\phi}{S_\varphi} \dot{S}_\varphi = \alpha \dot{\varepsilon}_{vol} \quad (3.25)$$

mit den in den Abschnitten 3.2.2 und 3.2.3 eingeführten Bezeichnern sowie

$p$  Porenmischedruck (äquiv. Porendruck für FLAC<sup>3D</sup> als Funktion von  $p_l, p_g$ ) in MPa,

$\varepsilon^{th}$  thermischer Verzerrungstensor, dimensionslos,

$\alpha_{th}$  thermischer Längenausdehnungskoeffizient in  $K^{-1}$ ,

$T$  Temperatur in  $K$  oder  $^\circ C$ ,

$\tilde{M}_\varphi$  Biot-Modul in MPa,

$\varepsilon_{vol}$  Volumenverzerrung, dimensionslos.

Die Ermittlung des Porenmischedrucks als äquivalentem Porendruck für den nur einen singulären Porenwasserdruck unterstützenden geomechanischen Simulator FLAC<sup>3D</sup> kann vom Benutzer des FTK-Simulators wahlweise über eine sättigungsgewichtete Mittelung der Porendrücke der beiden Phasen erfolgen ( $p = \sum_\varphi S_\varphi p_\varphi$ ) oder aber über die Verwendung des höheren der



beiden Drücke ( $p = p_g$ ). Beide Gleichungen sind auch bereits im TOUGH-FLAC-Simulator zur Porenmischdruckberechnung eingesetzt worden.

Der in Gleichung (3.11) integrierte Diffusionsterm aus dem ersten *Fickschen* Gesetz wird bis dato noch nicht im FTK-Simulator berücksichtigt (d.h. es ist  $D_\varphi = 0 \text{ m}^2/\text{s}$  für alle Komponenten und Phasen), da im Rahmen der mit dem Simulator bisher durchgeführten Simulationen dem Effekt von molekularen Diffusionsprozessen keine signifikante Rolle gegenüber dem Effekt von konvektiven Transportprozessen beigemessen worden ist. Eine Nachimplementierung der Unterstützung der molekularen Diffusion in den FTK-Simulator ist aber mit relativ geringem Aufwand möglich.

Die im FTK-Simulator gekoppelten Teilsimulatoren  $\text{FLAC}^{3\text{D}}$  und TOUGH2 stellen unterschiedliche Anforderungen an die Diskretisierung des Berechnungsmodells. Diese Anforderungen der beiden Simulatoren sind nicht auf einfache Weise miteinander vereinbar, so dass eine  $\text{FLAC}^{3\text{D}}$ -konforme Diskretisierung in der Regel TOUGH2-inkonform ist und umgekehrt. Zur Behebung dieser grundlegenden, in der jeweiligen Numerik begründeten Diskrepanz und ohne ihre Beachtung dann auch von vornherein schon vorhandenen Existenz einer systematischen Fehlerquelle kann aus dem FTK-Simulator heraus das Programm *Voro++* gestartet werden, *Rycroft (2009)*, das die in  $\text{FLAC}^{3\text{D}}$  erstellte Modelldiskretisierung vorab in eine TOUGH2-konforme Paralleldiskretisierung mit sogenannter *Voronoi*-Struktur transformiert. Des Weiteren werden die in TOUGH2 erforderlichen zusätzlichen Modellzonen zur Aufbringung von hydraulischen und thermischen *Dirichlet*- und *Neumann*-Randbedingungen (Fixierung des Zahlenwertes bzw. seiner Änderung) gemäß den Benutzereingaben automatisch von den FTK-Funktionen erstellt und initialisiert. Zu den Daten für die *Neumann*-Randbedingungen zur Definition hydraulischer Quellen gehören in TOUGH2 auch Zahlenwerte für die spezifischen Enthalpien der hinzuströmenden Fluide, um den konvektiven Wärmeenergieeintrag in das modellierte System zu berücksichtigen. Eine anwendungsfreundlichere Art der Festlegung des konvektiven Wärmeenergieeintrags ist im FTK-Simulator bis dato über eine Zusatzzone für jede Quelle ermöglicht worden, deren Temperatur vom Benutzer festgelegt und vom Simulator fixiert worden ist. Eine manuelle Umrechnung zwischen modellierungsbedingt gegebener Temperatur und programmtechnisch geforderter Enthalpie konnte somit entfallen. Die Verwendung derartiger Zusatzzonen kann allerdings auch mit gewissen numerischen Nachteilen verbunden sein (rechnerischer Mehraufwand, numerische Instabilitäten).

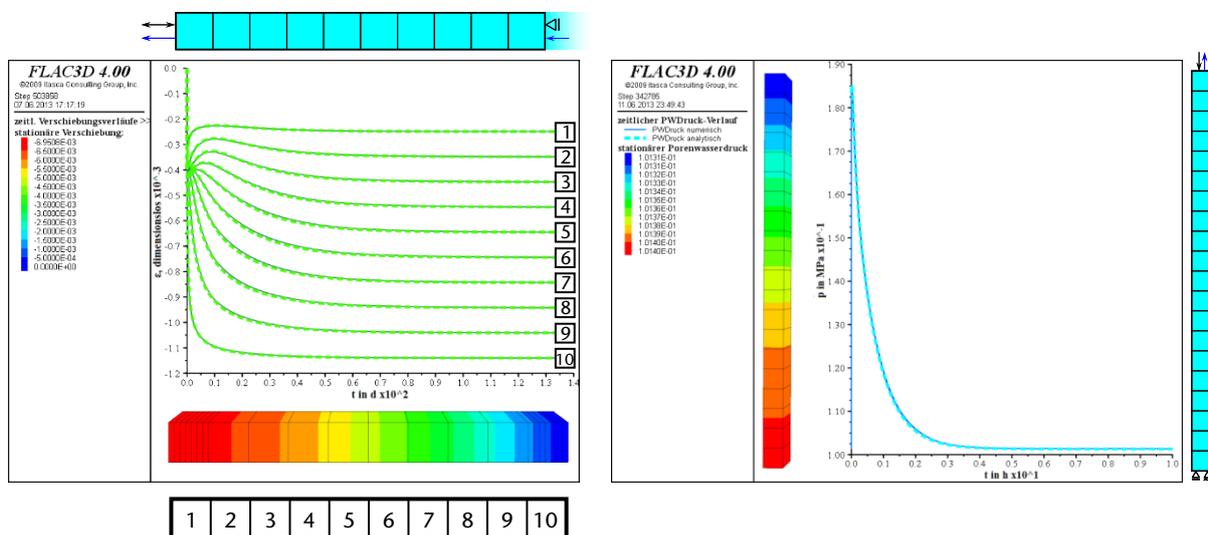


Da sich großräumig angelegte TH<sup>2</sup>M-gekoppelte Simulationen mit dem FTK-Simulator z.B. für Endlagerteilsysteme als sehr zeitintensiv herausgestellt haben (siehe weiter unten), ist im Rahmen des ENTRIA-Projekts die Idee der Einbeziehung von sogenannten Funktionalmodellen in den Simulator in die bei diesen großräumigen Modellen thermohydraulisch fokussierte Simulation verfolgt worden, z.B. Funktionalmodell Konvergenz oder Funktionalmodell Quelldruck, *Lux et al. (2018)*, *Zhao (2017)*. Auf ähnliche Weise sind auch bereits für andere Simulatoren und Projekte Funktionalmodelle entwickelt worden, z.B. *Becker et al. (2009)*, *Niemeyer et al. (2009)* und *Kock et al. (2012)*. Bei den Konvergenz-Funktionalmodellen wird über eine Konvergenzformel in Abhängigkeit der thermohydraulischen Zustandsgrößen die Verringerung des Porenraumes des Versatzmaterials und die daraus resultierende Porendruckerhöhung bzw. Sättigungsveränderung berechnet. Die Anwendung von derartigen Funktionalmodellen erspart die Simulatorenkopplung und damit sowohl die zeitaufwendige Interkommunikation zwischen den beiden Simulatoren FLAC<sup>3D</sup> und TOUGH2 wie auch die mechanische Zustandsausbalancierung nach jedem Rechenschritt, so dass FLAC<sup>3D</sup> wie oben beschrieben lediglich als Prä- und Postprozessor für TOUGH2 agiert. Auf diese Weise wird die Berechnungszeit insbesondere bei räumlich sehr ausgedehnten Berechnungsmodellen (Globalmodellen) mit einer großen Zahl an Modellzonen auf signifikante Weise reduziert. Derartige Globalmodelle ermöglichen die konfigurativ realitätsnahe Simulation von großräumigen Endlagerteilsystemen mit Fokus auf die langfristige fluiddynamische Systementwicklung, auf der dann die Simulation der Radionuklidmigration aufbaut. Damit können die bislang üblichen Kompartimentmodelle konfigurativ erheblich detaillierter ausgestaltet werden.

#### *Erfahrungen des Projektpartners TUC mit dem FTK-Simulator*

Im Rahmen der Entwicklung des FTK-Simulators sind bereits mehrere Arbeiten zur Verifizierung des Simulators im Hinblick auf die HM-Kopplung mit ein- und zweidimensionalen Berechnungsmodellen durchgeführt worden, *Lux et al. (2015, 2018)*. Bei der Verifizierung wurden sowohl Ein- wie auch Zweiphasenflussprozesse betrachtet, und die Zustandsverläufe aus den gekoppelten Simulationen sind sowohl analytischen Lösungen der zugrunde liegenden Differenzialgleichungen (1D-Modelle, H<sup>1</sup>M-Prozesse) wie auch Simulationsergebnissen mit anderen Simulatoren (2D-Modelle, H<sup>1</sup>M- und H<sup>2</sup>M-Prozesse) gegenübergestellt worden. Darüber hinaus ist eine umfassende Anwendung des FTK-Simulators im Rahmen des Projekts ENTRIA erfolgt.

Bei den Vergleichen von Berechnungsergebnissen des FTK-Simulators mit analytischen Lösungsformeln in Abhängigkeit von Zeit und Ort sind für die jeweiligen Berechnungsmodelle ausnahmslos gute bis sehr gute Vergleichsergebnisse erhalten worden. Bild 3.4 zeigt als Beispiel zwei Diagramme mit Gegenüberstellungen von numerisch und analytisch berechneten HM-Zustandsverläufen. Für sehr gute Übereinstimmungen sind allerdings auch schon bei den vergleichsweise sehr kleinen 1D-Berechnungsmodellen eher längere Berechnungszeiten in Kauf zu nehmen, d.h. es zeichnet sich bereits ab, dass insbesondere bei umfangreicheren Modellgeometrien zwischen dem tolerierten Genauigkeitsgrad und einer akzeptablen Simulationsdauer abzuwägen sein wird.



**Bild 3.4:** Zwei exemplarische Ergebnisse der Verifizierungsarbeiten des FTK-Simulators anhand von analytisch lösbaren HM-gekoppelten Modellbeispielen aus Lux et al. (2015) mit numerisch (dunklere, durchgezogene Linien) und analytisch (hellere, gestrichelte Linien) berechneten Kurven – links: an zehn Punkten eines linearen, stark idealisierten Gebirgsmodells berechnete instantane und zeitabhängige Verzerrungsentwicklungen infolge einer mechanischen Entlastung am linken Modellrand und einer Regeneration des Porendruckniveaus am rechten Modellrand (Bild mit korrigierter Kurvennummerierung), rechts: konsolidierungsinduzierter Porenwasserdruckauf- und -abbau in der Mitte eines homogenen Bodenschichtmodells (Vertikalschnitt) unter gleichförmiger mechanischer Belastung der Modelloberseite

Mit steigender Größe des Berechnungsmodells steigt tendenziell auch der Interkommunikationsaufwand zwischen  $\text{FLAC}^{3\text{D}}$  und TOUGH2 im FTK-Simulator, da größere Mengen an Zustandsdaten zu übertragen sind und dieser Übertragungsvorgang in der Regel häufiger durchzuführen ist aufgrund eines eher zu erwartenden Aufbaus von thermischen, hydraulischen und/oder mechanischen Ungleichgewichten. Im zeitlichen Verlauf stattfindende Gas- und/oder



Wärmeproduktionen führen insbesondere bei dreidimensionalen Modellgeometrien zum Anstieg von Strömungsgeschwindigkeiten und mechanischen Disbalancen an unterschiedlichen Stellen des Modells zu unterschiedlichen Zeiten in unterschiedlichen Intensitäten, so dass eine Erhöhung der Berechnungszeitschritte zumeist nicht zu erwarten ist. Insbesondere bei Berücksichtigung von Kriechprozessen, die zum einen zeitabhängiger Natur sind und zum anderen mit größeren Deformationen des geometrischen Modells einhergehen, wird einerseits die mechanische Zustandsausbalancierung in FLAC<sup>3D</sup> längere Zeit beansprucht und andererseits die oftmals erforderliche Neuerstellung der weiter deformierten Modelldiskretisierung für TOUGH2 die Dauer für die Interkommunikation zwischen den beiden beteiligten Simulatoren und auch mit Voro++ in die Höhe treiben.

Bei weniger umfangreichen Berechnungsmodellen konnten wiederum zufriedenstellende Resultate im Vergleich mit anderen Simulatoren erzielt werden. TH<sup>2</sup>M-Vergleichsberechnungen zwischen den Simulatoren FTK und TOUGH-FLAC an einem dreidimensionalen Modell mit 85.870 Zonen zum TSDE-Experiment (Thermal Simulation for Drift Emplacement, Lokation Asse, Versuchsanordnung: siehe Bild 3.5), das im Rahmen der Projekte BAMBUS und BAMBUS II durchgeführt und analysiert worden war (*Bechthold et al., 1999, 2004*), haben quantitativ sehr gute Übereinstimmungen in ihren Ergebnissen gezeigt. Bild 3.6 aus *Blanco Martín et al. (2016)* zeigt exemplarisch neben den entsprechenden Messdaten die Simulationsergebnisse für Temperaturentwicklungen im Bereich der installierten Erhitzer sowie für die Streckenkongruenz im (Position G1) und abseits (Position E2) des Erhitzerbereichs, die mit den Simulatoren FTK und TOUGH-FLAC erhalten worden sind. Des Weiteren haben H<sup>1</sup>M-Vergleichsberechnungen zwischen dem FTK-Simulator und FLAC<sup>3D</sup> an dem in Bild 3.7 dargestellten quasi-zweidimensionalen Berechnungsmodell eines Streckennahfelds im Tonsteingebirge (ohne Kriechprozesse) mit etwa 20.000 Zonen gezeigt, dass bei akzeptabler Qualität der Berechnungsergebnisse und insbesondere der Ergebnisse des FTK-Simulators auch der Unterschied in den Simulationsdauern beider Simulatoren sehr zugunsten des FTK-Simulators ausfallen kann, *Lux et al. (2015)*. Während der zeitabhängigen Simulation des Abbaus des initialen Porenwasserdruckfeldes im Gebirge ist der zeitliche Mehraufwand, der sich zu Simulationsbeginn durch stärkere Ungleichgewichte (Druckunterschiede und Spannungsdisbalancen) ergeben hat, durch eine gegenüber FLAC<sup>3D</sup> beschleunigte Berechnung im Verlauf der Simulationszeit signifikant überkompensiert worden.

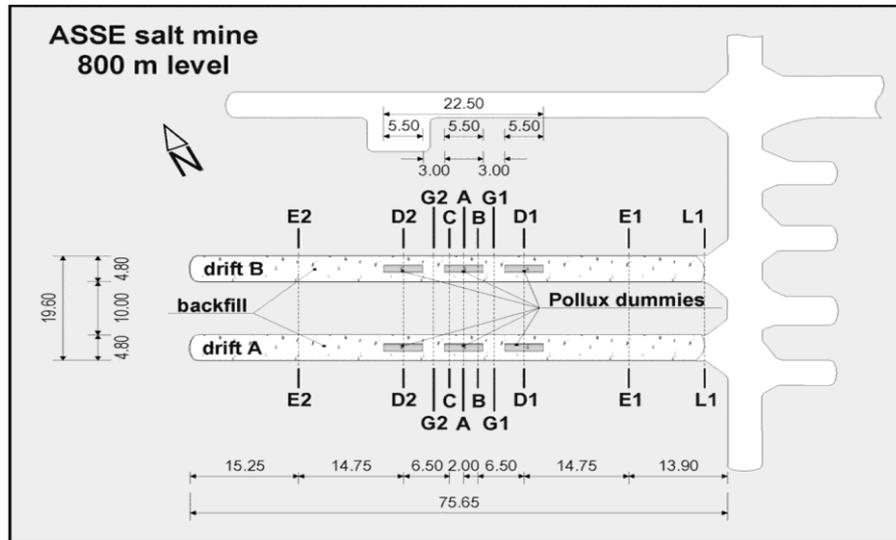


Bild 3.5: Versuchsanordnung zum TSDE-Experiment im ehemaligen Salzbergwerk Asse mit Positionierung von Messquerschnitten und Messbohrlöchern, Bechthold et al. (1999)

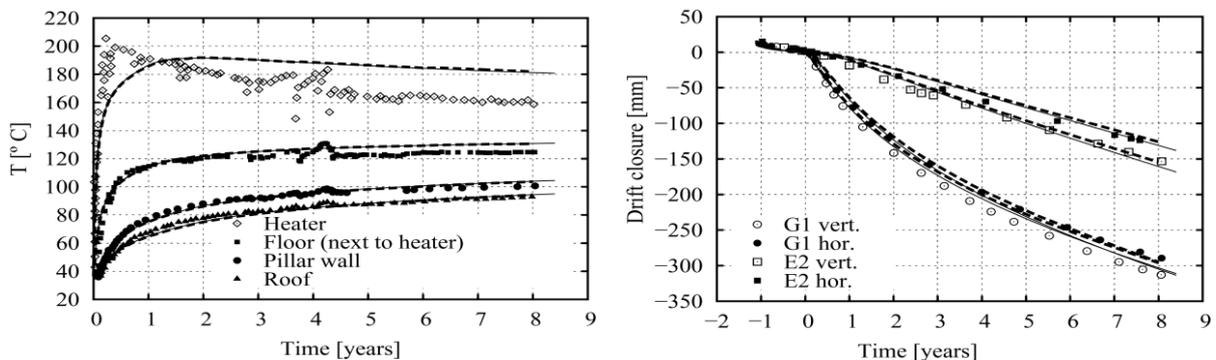
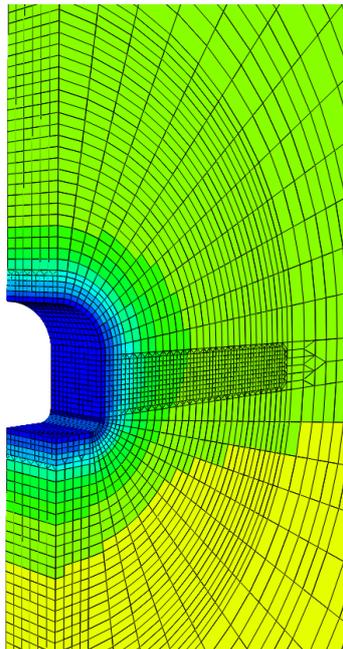


Bild 3.6: Messdaten (Punkte) und Simulationsergebnisse (Linien, gestrichelt: FTK-Simulator, durchgezogen: TOUGH-FLAC) aus Blanco Martín et al. (2016) zum TSDE-Experiment – links: Temperaturentwicklung an der Erhitzeroberfläche und im Salzgrusversatz in der Umgebung des Erhitzers, rechts: Streckenkonvergenz im nicht erhitzten Streckenbereich (Position E2) sowie zwischen zwei Erhitzern (Position G1)



*Bild 3.7: Quasi-zweidimensionales Streckenmodell aus Lux et al. (2015), d.h. dreidimensional modellierter und diskretisierter Tragsystemausschnitt, dessen Eigenschaften in Streckenachsenrichtung unverändert sind*

Im Rahmen des interdisziplinären Forschungsprojekts ENTRIA ist der FTK-Simulator erstmals umfassend zum Einsatz gebracht worden, Lux et al. (2018). Eine Vielzahl von Berechnungsvariationen zum TH<sup>2</sup>M-gekoppelten Systemverhalten des in Bild 3.8 dargestellten generischen Endlagerbergwerks im Tonstein- und auch im Salinargebirge ist mit dem FTK-Simulator durchgeführt worden, und die Berechnungsergebnisse aus diesen Variationen sind in sich konsistent und können plausibel nachvollzogen werden. Exemplarisch sind Gasströmungen in einem Teil des Streckensystems des Endlagers und in dem eine der Einlagerungstrecken umgebenden Tonsteingebirge lange Zeit nach Endlagerverschluss in den Bildern 3.9 und 3.10 aufgeführt. Über die violett gekennzeichnete, 40m über der Einlagerungssohle befindliche Überfahrungssohle, die während der Betriebszeit des Endlagers und einige Zeit danach zu Monitoringzwecken herangezogen wurde und zu den angegebenen Zeitpunkten bereits seit langer Zeit mit Bentonit verfüllt ist, wird hier ein Teil des durch Behälterkorrosion entstandenen Gases aus dem Endlagerbergwerk abtransportiert. Mithilfe der im Rahmen des ENTRIA-Projekts entwickelten visuellen Darstellung der Gasströmungsrate durch Vektorfelder können derartige Transportprozesse gut analysiert und entsprechenden Plots aus einer Referenzvariation gegenübergestellt werden, um Rückschlüsse auf den Einfluss von Modelländerungen (wie in diesem Beispiel der Errichtung der Überfahrungssohle) auf das Migrationsverhalten des möglicherweise Radionuklide mitführenden Gases zu ziehen.

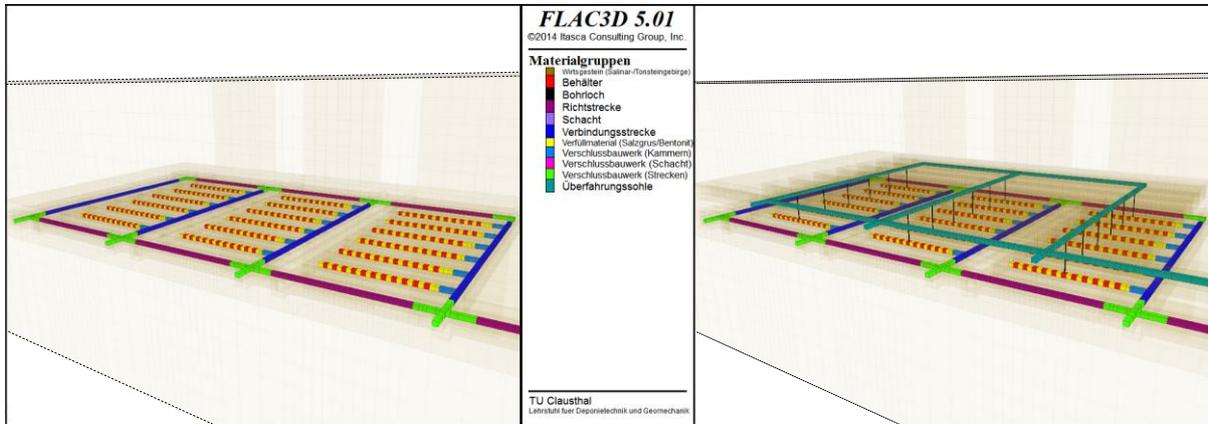


Bild 3.8: Berechnungsmodelle und Diskretisierungen des generischen Endlagerbergwerks im Rahmen des Forschungsprojekts ENTRIA (Globalmodell, im Bild ohne Schacht), Lux et al. (2018) – links: ohne, rechts: mit Überfahrungssohle

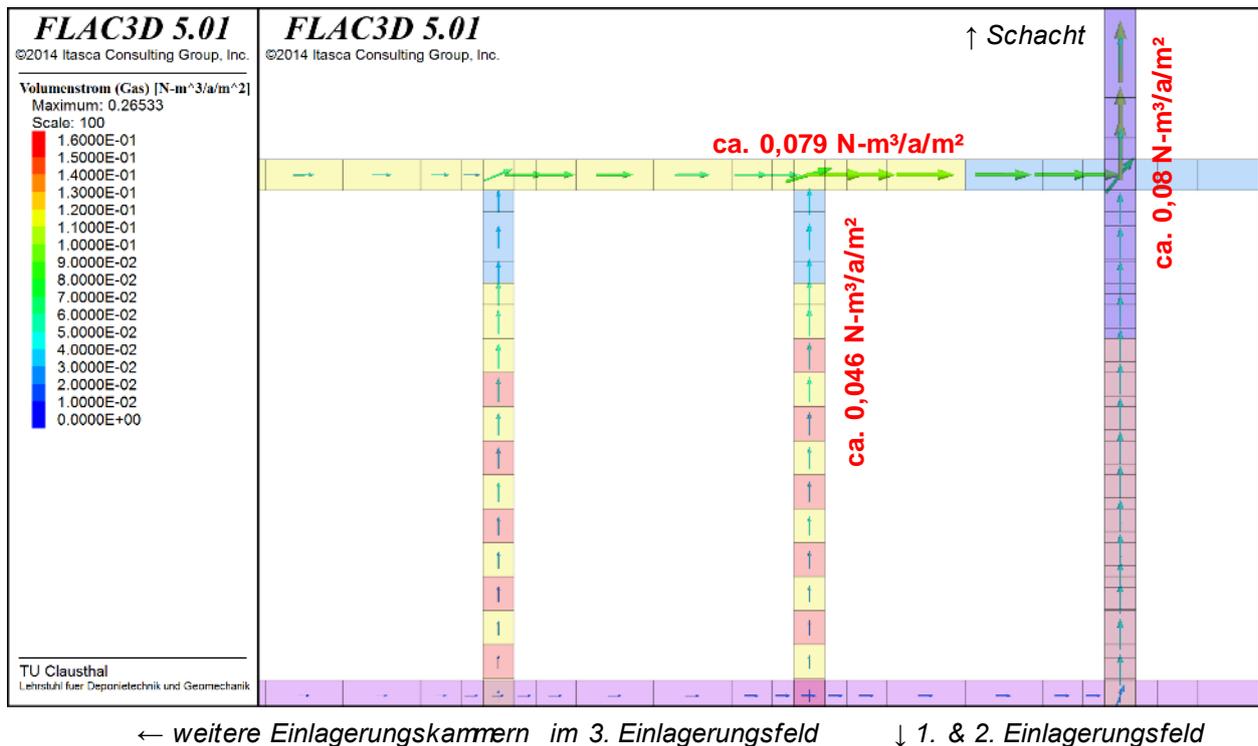


Bild 3.9: Gasströmung innerhalb des Streckensystems zum Zeitpunkt  $t = 200.000a$  nach Verschluss des Endlagers, Lux et al. (2018)

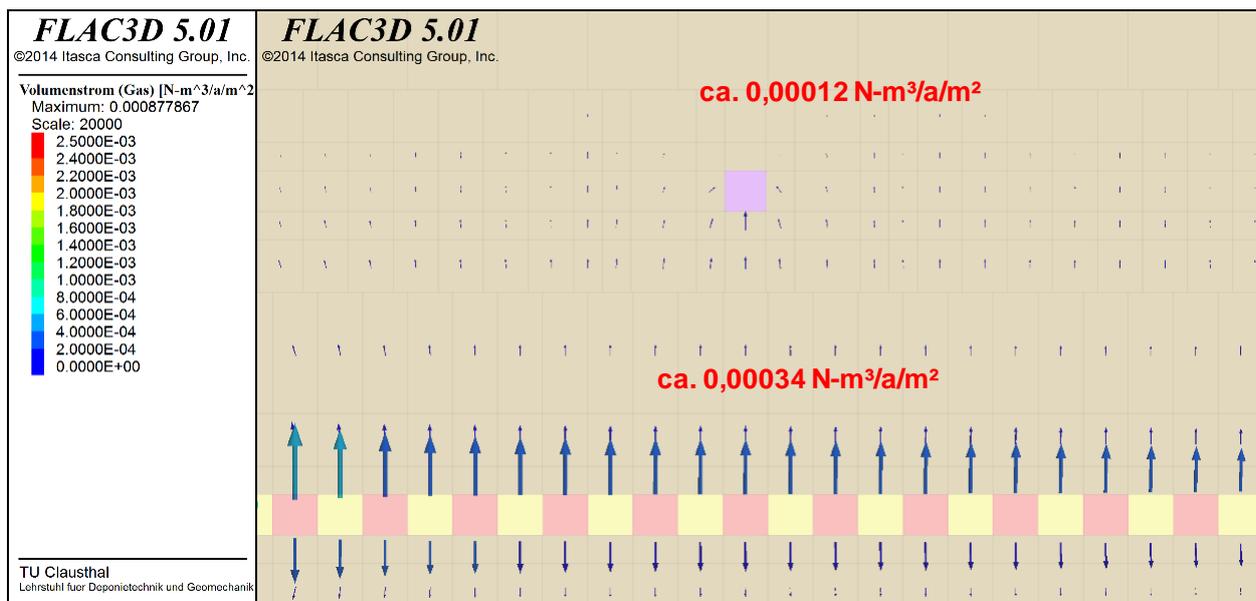


Bild 3.10: Gasströmung aus einer versetzten Einlagerungsstrecke in das umgebende Tonsteingebirge zum Zeitpunkt  $t = 100.000a$  nach Verschluss des Endlagers, Lux et al. (2018)

### 3.2.5 Die Simulatoren TOUGH-FLAC und TFC

Der THM-Simulator TOUGH-FLAC, der wie der FTK-Simulator ebenfalls die beiden Simulatoren TOUGH2 und FLAC<sup>3D</sup> miteinander koppelt, ist vom BenVaSim-Projektpartner LBNL, Abteilung Hydrogeologie der Energie-Geowissenschafts-Division, um die vergangene Jahrtausendwende implementiert und seither weiterentwickelt worden. Die in diesem Bericht genannten grundlegenden Informationen zu TOUGH-FLAC und insbesondere die diesem Simulator zugrunde liegenden mathematischen Gleichungen stammen dabei primär aus *Rutqvist et al. (2002)* und *Rutqvist (2011)*.

#### *Simulationsprozess und Eigenschaften des TOUGH-FLAC-Simulators*

Aufgrund der wissenschaftlichen Ausrichtung der Abteilung, die den TOUGH-FLAC-Simulator entwickelt hat, ist der Simulator – wengleich beidseitig gekoppelt – bis dato vom Standpunkt der Geohydraulik aus betrachtet und programmiert worden, d.h. mit Fokus auf TOUGH2 und mit FLAC<sup>3D</sup> primär in der Rolle des zuarbeitenden geomechanischen Simulators für die Berücksichtigung von M→H-Einflüssen. Die Kopplung der beiden involvierten Simulatoren



ist auch in dieser Implementierung sequenziell realisiert. Die Simulation eines Geosystems kann dabei auf drei unterschiedliche Arten erfolgen, bei denen in jedem Zeitschritt entweder

- zunächst die vollständige Berechnung der thermohydraulischen Zustandsänderung erfolgt, bevor FLAC<sup>3D</sup> einmalig zur Anpassung der geomechanischen Zustandsgrößen aufgerufen wird (expliziter Algorithmus, d.h. zur Berechnung der TH-Zustandsänderung wird der M-Zustand vom Beginn des Zeitschritts verwendet), oder
- nach jedem *Newton*-Iterationsschritt innerhalb des simulierten Zeitschritts in der thermohydraulischen Berechnung die geomechanischen Zustandsgrößen durch FLAC<sup>3D</sup> ermittelt werden, oder aber
- zusätzlich zum M-Zustand alle Ableitungsterme in der *Jacobi*-Matrix, die im Rahmen des *Newton*-Verfahrens zu berechnen ist, nach jedem *Newton*-Iterationsschritt aktualisiert werden (impliziter Algorithmus, d.h. zur Berechnung der TH-Zustandsänderung wird der M-Zustand vom Ende des Zeitschritts verwendet).

Die letzten beiden Arten der Simulation sind einerseits zwar interkommunikations- und rechenzeitintensiver, besitzen andererseits aber auch einen gewissen Stabilitätsvorteil mit Blick auf den numerischen Lösungsprozess und erlauben damit generell größere Zeitschritte. Für Rechenfälle, bei denen sich Porosität und Permeabilität nur langsam verändern – wie z.B. bei modellierten Endlagersystemen, bei denen sich diese Größen im Wesentlichen durch langsam ablaufende thermische Prozesse ändern – ist es unerheblich, ob die geomechanischen Zustandsgrößen vom Beginn oder Ende des Zeitschritts verwendet werden, und der explizite Algorithmus liefert hier bereits hinreichend genaue Berechnungsergebnisse.

Für die Kopplung der thermohydraulischen mit den mechanischen Prozessen in TOUGH-FLAC sind „Module“ erforderlich (nicht zu verwechseln mit den TOUGH2-EOS-Modulen), deren TH↔M-Beziehungen von den modellierten Geomaterialien und Gebirgsschichten abhängen. Auf eine M→T-Kopplung wird dabei nicht eingegangen. Eine TH→M-Kopplung in TOUGH-FLAC erfolgt wie im FTK-Simulator nach den Gleichungen (3.23) und (3.24) aus FLAC<sup>3D</sup>, und als erste Beziehung wird in *Rutqvist et al. (2002)* für die Bestimmung des Poren-mischdrucks in porösem Sedimentgestein die Formel  $p = \sum_{\varphi} S_{\varphi} p_{\varphi}$  vorgeschlagen. In späteren Anwendungen ist auch  $p = p_g$  gesetzt worden. Eine M→H-Kopplung wird in TOUGH-FLAC ähnlich wie bei dem FTK-Simulator über die durch die mechanische Teilsimulation erhaltene



Größe der Volumenverzerrung realisiert, wobei die Volumenverzerrung hier nicht gemäß Gleichung (3.25) die Porendrücke und Sättigungen direkt verändert, sondern indirekt in Form eines zusätzlichen Quellterms in die Massenbilanzgleichung (3.10) einfließt, der die Porendrücke und Sättigungen durch die dann folgende thermohydraulische Teilsimulation beeinflusst. Die Massenbilanzgleichung wird damit zu:

$$M \rightarrow H: \quad -\sum_{\varphi} \nabla \cdot q_{m;\kappa\varphi} + (\hat{q}_{m;\kappa} - \zeta_{m/V;\kappa} \cdot \alpha \dot{\varepsilon}_{vol}) = \dot{\zeta}_{m/V;\kappa} \quad (3.26)$$

mit den in den Abschnitten 3.2.2 bis 3.2.4 eingeführten Bezeichnungen.

Des Weiteren werden mittels der durch die mechanische Teilsimulation aktualisierten Effektivspannungen  $\sigma_{eff}$  und ggf. auch Verzerrungen neue Zahlenwerte für die von FLAC<sup>3D</sup> konstant gehaltene Porosität, die intrinsische Permeabilität und den nach benutzerdefinierten Gleichungen berechnet (M→H-Parameterkopplung), die in *Rutqvist et al. (2002)* mit Bezug auf eine poröse Gesteinsmatrix die folgende Form haben:

$$\phi = \phi_r + (\phi_0 - \phi_r) e^{-a\bar{\sigma}_{eff}} \quad (3.27)$$

$$K = K_0 e^{c\left(\frac{\phi}{\phi_0} - 1\right)} \quad (3.28)$$

$$p_{cap} = p_{cap;0}(S_l) \sqrt{\frac{K_0 \phi}{K \phi_0}} \quad (3.29)$$

mit der Notation  $\bar{\sigma} = (\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)/3$  für eine mittlere Spannung sowie

- $\phi$  Porosität des Mediums, dimensionslos,
- $\phi_r$  Restporosität des Mediums bei sehr hohen Spannungen, dimensionslos,
- $\phi_0$  Porosität des unbelasteten Mediums, dimensionslos,
- $a$  Materialparameter in  $MPa^{-1}$ ,
- $K$  intrinsische Permeabilität des Mediums in  $m^2$ ,
- $K_0$  intrinsische Permeabilität des unbelasteten Mediums in  $m^2$ ,
- $c$  Materialparameter, dimensionslos,
- $p_{cap}$  Kapillardruckfunktion des Mediums in  $MPa$ ,
- $p_{cap;0}$  Kapillardruckfunktion des unbelasteten Mediums in  $MPa$ .



Die Anpassung des Kapillardrucks in Gleichung (3.29) mit dem Faktor  $\sqrt{K_0\phi/(K\phi_0)}$  wird dabei *Leverett*-Skalierung genannt, *Leverett (1940)*. Eine alternative Beziehung für  $\phi$  bzw. für das Inkrement  $\Delta\phi$  kann beispielsweise aus *Settari & Mourits (1998)* herangezogen werden. Für geklüftete Materialien werden in *Rutqvist et al. (2002)* zusätzliche Gleichungen für die Kluftporositäten, -permeabilitäten und -kapillardrücke vorgeschlagen.

Umgekehrt kann auch eine TH→M-Parameterkopplung erfolgen, bei der Stoffmodellparameter wie Verformungsmodul oder plastische Scherparameter an TH-Zustandsänderungen angepasst werden. Zusätzlich können weitere TH→M-Kopplungsbeziehungen in die Modellierung und Simulation mit TOUGH-FLAC einbezogen werden, wie beispielsweise durch Quellungs- und Schrumpfungsvorgänge induzierte Verzerrungen, die rechnerisch durch das vom LBNL in den Simulator integrierte *Barcelona Basic Model (BBM)* ermittelt werden, *Rutqvist et al. (2011)*, *Alonso et al. (1990)*.

#### *Erfahrungen des Projektpartners LBNL mit dem TOUGH-FLAC-Simulator*

Das LBNL hat seit über einem Jahrzehnt umfangreiche Erfahrungen mit dem TOUGH-FLAC-Simulator gesammelt, siehe z.B. *Rutqvist & Tsang (2003)*, *Rutqvist & Moridis (2008)*, *Rutqvist et al. (2009)*, *Rutqvist (2011)*, *Zheng et al. (2015)*, *Rutqvist (2017)*. Dabei erstrecken sich seine Anwendungsbereiche über viele unterschiedliche Nutzungsmöglichkeiten des geologischen Untergrunds zum Thema Energie – angefangen von der Gewinnung von Wärmeenergie und Rohstoffen über die Zwischenspeicherung elektrischer Energie in Form von Druckluft bis hin zur Endlagerung radioaktiver Abfälle und zur CO<sub>2</sub>-Sequestrierung. Mit dem TOUGH-FLAC-Simulator analysiert worden sind beispielsweise die in geothermischen Reservoirs induzierten Rissaktivierungen zur Stimulation des Wärmetransportvorgangs sowie die auf diese Weise erzeugte seismische Aktivität des Reservoirgebirges, *Rutqvist et al. (2016)* bzw. *Jeanne & Rutqvist (2015)*, die Stabilität und Integrität einer ausgebauten Druckluftspeicherkaverne im nichtsalinaren Felsgestein bei multizyklischem Betrieb, *Rutqvist et al. (2012)* und *Kim et al. (2012)*, sowie die observierte Anhebung der Tagesoberfläche bei einem Pilotprojekt zur CO<sub>2</sub>-Sequestrierung in industriellem Maßstab, *Rinaldi & Rutqvist (2017)*.

Im Bereich der Endlagerforschung bestehen beim LBNL auch umfangreiche Simulationserfahrungen mit TOUGH-FLAC durch die Teilnahme am im Abschnitt 2.2.2 vorgestellten DECOVALEX-Projekt, siehe z.B. *Datta (2005)* und *Hudson et al. (2012)*. Seit der im Jahr 2012



begonnenen Kooperation mit der TUC erstrecken sich diese Simulationserfahrungen auch verstärkt über Endlagersystemmodellierungen und Simulationen im Salinargestein, *Blanco Martín et al. (2015)*, insbesondere durch die Verwendung des von der TUC entwickelten Stoffmodells *Lux/Wolters* und durch die Berücksichtigung von großen Deformationen bei der Simulator-Kopplung, *Rutqvist (2017)*, *Blanco Martín et al. (2017)*.

### *Eigenschaften des Simulators TFC und Erfahrungen des Projektpartners GRS K*

In Anlehnung an TOUGH-FLAC ist auch vom Projektpartner GRS K ein aus TOUGH2 und FLAC<sup>3D</sup> gekoppelter THM-Simulator mit dem Namen TFC (TOUGH2-FLAC<sup>3D</sup>-Coupling) entwickelt worden, dessen Funktionsweise auf HM-Prozesse fokussiert in *Hotzel (2014)* beschrieben ist. Die grundlegenden Eigenschaften, die in diesem Abschnitt zum TOUGH-FLAC-Simulator des LBNL aufgeführt worden sind, sind der genannten Literaturquelle zufolge bis zu einem gewissen Grad auch für TFC gültig (sequenzielle Kopplung, keine M→T-Kopplung, benutzerdefinierte Module für die verbleibenden TH↔M-Prozessinteraktionen) mit folgenden Unterschieden:

- Es wird ausschließlich der explizite Algorithmus für die thermohydraulischen Prozesse angewendet. Die Simulatorkopplung erfolgt also vollständig sequenziell ohne Anpassung von Zustandsgrößen des jeweils nicht ablaufenden Prozesses, d.h. für jeden Zeitschritt erfolgt eine vollständige TH-Teilberechnung gefolgt von einer einzelnen M-Teilberechnung.
- Die Berechnung der Effektivspannung nach *Biot* gemäß Gleichung (3.23) kann für die H→M-Kopplung optional deaktiviert werden, ohne dass andere Kopplungsbeziehungen von dieser Wahl beeinflusst werden.
- Im TFC-Simulator erfolgt auch eine M→H-Kopplung in der Art von Gleichung (3.26), bei der die durch eine mechanisch induzierte Porenvolumenänderung bei gleichbleibenden Drücken indirekt entfernten oder hinzugefügten Fluidmengen durch Quellen bzw. Senken in TOUGH2 kompensiert werden.
- M→H-Parameterkopplungen sind hingegen in TFC enthalten, wenngleich nicht über die für TOUGH-FLAC angegebenen Beziehungen. Stattdessen sind folgende Optionen zum Einfluss von Spannungsänderungen auf Porositäten und Permeabilitäten in TFC imple-

mentiert: Zum einen kann eine inkrementelle Porositätsänderung gemäß der Poroelastizitätstheorie nach *Biot (1941)* über den Term  $\Delta\phi = \frac{\Delta\bar{\sigma}_{tot} - \Delta p}{\bar{K}}(\phi_{alt} - \alpha)$  mit dem drainierten Kompressionsmodul  $\bar{K}$  erfolgen und eine inkrementelle Permeabilitätsanpassung in der Folge über eine Potenzfunktion in  $\phi$  modelliert werden, zum anderen kann eine von mehreren zur Verfügung stehenden direkten Effektivspannungs-Permeabilitäts-Beziehungen verwendet werden. Auch können die hier genannten M→H-Parameterkopplungen gänzlich deaktiviert werden.

Der TFC-Simulator ist aus einem für einen speziellen Anwendungsfall im Bereich der radioaktiven Endlagerung eingesetzten Simulator aus TOUGH2 und FLAC<sup>3D</sup> heraus entwickelt worden, indem anwendungsfallsspezifische Passagen in den Kopplungsfunktionen entsprechend verallgemeinert und flexibilisiert worden sind. Einsatz fand der Simulator erstmals für begleitende Simulationsberechnungen zu einem In-situ-Gasinjektionsgroßversuch im Salinargestein der thüringischen Lokation Merkers, *Popp et al. (2012)*. Basierend auf das für die In-situ-Simulationen erstellte stilisierte geometrische Modell sind dann im Anschluss in *Hotzel (2014)* weitere, nicht speziell auf die Lokation Merkers bezogene Variationsberechnungen mit TFC mit Blick auf die Studie von Phänomenen, die speziell durch eine HM-Prozesskopplung induziert werden, durchgeführt worden.

### 3.2.6 Der Simulator CODE\_BRIGTH

Das Simulationsprogramm CODE\_BRIGTH (Coupled Deformation, Brine, Gas, and Heat Transport, in diesem Abschnitt nachfolgend aufgrund der häufigen Benennung mit „C\_B“ abgekürzt) ist in den Neunzigerjahren des vergangenen Jahrhunderts von der Polytechnischen Universität Kataloniens (UPC) in Barcelona in der Programmiersprache Fortran verfasst worden. C\_B war ursprünglich für THM-gekoppelte Simulationen von Geosystemen im Salinargestein vorgesehen, ist allerdings im Verlauf der Zeit umfassend erweitert worden und wird von vielen Organisationen in Europa und Nordamerika auch für andere Gesteinstypen angewendet. Die in diesem Bericht gegebenen Informationen zu C\_B stammen primär aus dem Benutzerhandbuch *UPC (1994a–2017a)* und der Arbeitsanleitung *UPC (2017b)* zum Simulator sowie aus *Olivella et al. (1994)*.



### *Eigenschaften und Simulationsprozess von CODE\_BRIGHT*

C\_B wird von dem nichtkommerziellen Programm GiD gesteuert, das vom Internationalen Zentrum für Numerische Methoden im Ingenieurwesen (CIMNE) in Barcelona als Prä- und Postprozessor für Simulatoren aus unterschiedlichen ingenieurstechnischen Disziplinen konzipiert worden ist. Über die grafische Benutzeroberfläche des Präprozessors können vom Benutzer das Berechnungsmodell, die Modelldaten und -parameter, die Rand- und Anfangsbedingungen, numerische Steuerungsparameter sowie andere simulationsrelevante Daten zusammengestellt werden, wobei insbesondere hinsichtlich der Modellgeometrie neben Dateneingabemasken auch visuell orientierte Eingabemöglichkeiten bestehen (z.B. die Erstellung von Modellrandlinien über Mausklicks in einem Koordinatensystem), *UPC (2017b)*. Auch noch nach Zusammenstellung der genannten Eingabedaten kann die Diskretisierung des Berechnungsmodells durch GiD auf strukturierte oder unstrukturierte Weise erfolgen. Eingabedaten wie Randbedingungen oder die Modellgeometrie sind damit nicht an eine konkrete Diskretisierung gebunden, d.h. sollten kleine Änderungen an diesen Daten erforderlich werden, kann im Anschluss auf einfache Weise eine neue Diskretisierung erstellt werden. Alternativ zur Vorverarbeitung (preprocessing) mit GiD kann ein diskretisiertes Modell auch über andere CAD-Präprozessoren erstellt und in GiD eingelesen werden, wenn es vom Präprozessor in bestimmten Datenformaten gespeichert bzw. übertragen werden kann. Mit dem Befehl in GiD zur Durchführung der Simulation erfolgen im Anschluss an die Vorverarbeitung automatisch eine Übergabe der Eingabedaten von GiD nach C\_B, ein Aufruf des Simulators C\_B sowie eine Rückgabe der Ausgabedaten von C\_B nach GiD zur Visualisierung der Simulationsergebnisse (Nachverarbeitung/postprocessing).

Mit C\_B können sowohl zwei- wie auch dreidimensionale Berechnungsmodelle erstellt und simuliert werden. Die Modelldiskretisierung besteht in diesem Simulator aus Dreiecks- und Viereckselementen bei zweidimensionalen Berechnungsmodellen bzw. aus Tetraeder- und Hexaederelementen bei dreidimensionalen Modellen. Sollte von den Projektpartnern im Verlauf des BenVaSim-Projekts entschieden werden, Diskretisierungen zu bestimmten Modellbeispielen in Übereinstimmung zu bringen, so ist dabei diese Rahmenbedingung von C\_B zu berücksichtigen.

C\_B benutzt finite Elemente für die räumliche Diskretisierung des Berechnungsmodells und eine implizite Finite-Differenzen-Methode für die zeitliche Berechnung der durch die modellierten TH<sup>2</sup>M-gekoppelten Prozesse gesteuerten Zustandsentwicklung. Die Lösung der über die



beiden Diskretisierungen erhaltenen Gleichungen wird dann in jedem Zeitschritt über das *Newton*-Verfahren erhalten. Es erfolgt in C\_B also keine sequenzielle Lösung der thermohydraulischen und der mechanischen Prozessgleichungen, sondern eine simultane, monolithische Berechnung aller neuen Zustandsgrößen unter vollständiger Prozesskopplung. Die betrachteten mathematischen Gleichungen stimmen dabei an vielen Stellen mit den Gleichungen für FLAC<sup>3D</sup> und TOUGH2 aus den Abschnitten 3.2.2, 3.2.3 und 3.2.4 überein, es bestehen aber auch Unterschiede:

- Die Gleichungen (3.1), (3.2) und (3.3) (Bewegungsgleichung, Verzerrungstensor, Stoffmodell) haben für die mechanischen Prozesse prinzipiell Bestand, wobei der Massenträgheitsterm  $-\rho\dot{v}$  aufgrund von als verhältnismäßig gering anzusehenden Deformationsraten verschwindet und der Bezug der konstitutiven Gleichung auf rotierte Zonen nicht explizit erwähnt wird. Im Gegensatz zu FLAC<sup>3D</sup> wird in C\_B die Porosität allerdings als veränderlich angenommen, und für die Berechnung ihrer Änderung wird in Analogie zu den Bilanzgleichungen (3.10) und (3.13) eine Bilanzgleichung für die Masse des Mineralkorngerüsts (Feststoffphase,  $\varphi = \kappa = s$ ) verwendet:

$$-\nabla \cdot q_{m;s} = \dot{\zeta}_{m/V;s} \quad (3.30)$$

mit

$q_{m;s}$  Massenstromdichte des Feststoffs in  $kg/m^2s$ ,  $q_{m;s} = (1 - \phi)\rho_s v$ ,

$\zeta_{m/V;s}$  Massengehalt (pro  $m^3$  Medium) an Feststoff in  $kg/m^3$ ,  $\zeta_{m/V;s} = (1 - \phi)\rho_s$ .

Aus der materiellen Ableitung von  $\zeta_{m/V;s}$  lässt sich unter Zuhilfenahme von Gleichung (3.30) die Beziehung  $D\zeta_{m/V;s}/Dt = -\zeta_{m/V;s} \nabla \cdot v$  und mit der Definition von  $\zeta_{m/V;s}$  schließlich die Gleichung (3.31) für die materielle Porositätsänderung herleiten:

$$\frac{D\phi}{Dt} = (1 - \phi) \left( \frac{1}{\rho_s} \frac{D\rho_s}{Dt} + \nabla \cdot v \right) \quad (3.31)$$

mit

$D\psi/Dt$  materielle Ableitung für eine skalare oder vektorielle Größe  $\psi$ ,

$$D\psi/Dt = \dot{\psi} + (\nabla\psi)^T \cdot v.$$



- Den C\_B-Referenzen *UPC (2017a,b)* zufolge wird die Feststoffdichte  $\rho_s$  stets als Konstante in das Programm eingegeben. Bleibt die Feststoffdichte konstant, wäre die Porositätsänderung lediglich von der Matrixdeformation abhängig ( $D\phi/Dt = (1 - \phi) \nabla \cdot v$ ).
- Zwar erlauben die unterschiedlichen elastischen Stoffmodelle in C\_B nach *UPC (2017a)* keine Modellierung eines mechanisch anisotropen Mediums, aber in der Kategorie der komplexeren Stoffmodelle zur Modellierung von elastoplastischem Tongestein mit Schädigung („damage-elastoplastic model for argillaceous rocks“) kann für den elastischen Anteil an der Deformation auch eine mechanische Transversal-Isotropie angesetzt werden.
  - Für die hydraulischen Strömungsprozesse der Gas- und der Flüssigphase werden in C\_B ebenfalls Formeln entsprechend der bereits für TOUGH2 angegebenen Gleichungen (3.10), (3.11) und (3.12) (Massenbilanz, *Darcy*- und *Fick*-Transportgleichungen, Massengehalte) eingesetzt, wobei die intrinsische Permeabilität  $K$  hier als Tensor dargestellt wird und somit eine hydraulische Strömungsanisotropie modellierbar ist. Die Fluidkomponenten werden in den mit C\_B im Zusammenhang stehenden Literaturquellen als „species“ (Spezies, Arten) bezeichnet.
  - Auch hinsichtlich der thermischen Prozesse werden die Gleichungen (3.13), (3.14a), (3.15a/c/d) (Energiebilanz, Energiegehalt, Transportgleichungen) zur Modellierung herangezogen, wobei der Prozess der Wärmestrahlung nach *Stefan/Boltzmann* nicht berücksichtigt wird. Die Formulierung der thermischen Prozessgleichungen erfolgt zwar in Termen der Erhaltungsgröße der inneren Energie  $u_{\kappa\varphi}$  in *UPC (2017a)*, aber im Anschluss wird dort angemerkt, dass der Anteil der Volumenarbeit dabei vernachlässigt und die spezifische Enthalpie  $h_{\kappa\varphi}$  an ihrer Stelle betrachtet werden kann. Für den Prozess der Konvektion werden bei der Formulierung der Gleichungen somit zudem die spezifischen Enthalpien  $h_{\kappa\varphi}$  der beteiligten Komponenten anstelle der integralen spezifischen Enthalpien  $h_\varphi$  der Phasen verwendet, und aufgrund der Betrachtung von Feststoff-„Strömungen“ nach Gleichung (3.30) umfasst die zugehörige Konvektionsgleichung (3.15d) in C\_B auch die Feststoffphase  $\varphi = \kappa = s$ , wengleich der durch die mechanischen Deformationen induzierte Anteil am Wärmeenergietransport als untergeordnet angesehen wird:

$$q_E^{conv} = \sum_{\varphi; \kappa} h_{\kappa\varphi} q_{m; \kappa\varphi} \quad (3.32)$$



Ein thermisch anisotropes Material ist gemäß *UPC (2017a)* ebenfalls mit C\_B modellierbar.

- In C\_B stehen mehrere Ansätze für Kapillardruck- und Relativpermeabilitätsfunktionen zur Verfügung:
  - (1) Die meisten Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen in C\_B bauen auf dem Ansatz nach *van Genuchten* aus Gleichung (3.17) auf, wobei der Materialparameter  $\tilde{\alpha}$  hier als abhängig von der Oberflächenspannung der Grenzfläche von Flüssig- und Gasphase im Porenraum angesehen wird. Der Ansatz nach *Brooks/Corey* ist den Dokumentationen zufolge nicht in C\_B implementiert, wohl aber eine simple lineare Beziehung, welche allerdings eineindeutig bleiben muss. Eine Verwendung des Ansatzes  $p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}$  ist in C\_B damit nicht möglich.
  - (2) Für die relativen Permeabilitäten kann u.a. jeweils  $K_{rel;\varphi} \equiv 1$  oder  $K_{rel;\varphi} = S_{\varphi}$  gesetzt werden. Für  $K_{rel;l}$  sind die beiden Ansätze nach *Mualem/van Genuchten* (mit  $\tilde{\epsilon} = 1/2$  fixiert) und nach *Burdine/Brooks/Corey* entsprechend den Gleichungen (3.19) und (3.20) in C\_B einstellbar; für  $K_{rel;g}$  bestehen diese Optionen hingegen nicht.
- Während in C\_B analog zu TOUGH2 die Menge der in der Flüssigphase gelösten Luft durch das *Henry'sche* Gesetz bestimmt wird, wird der Massengehalt an Wasserdampf in der Gasphase („Dampfdichte“) in C\_B nicht indirekt über die empirische Gleichung (3.21) für den Dampfdruck, sondern durch die folgende Gleichung (3.33) beschrieben:

$$\frac{\theta_{wg}}{\theta_{wg;0}(T)} = e^{-\frac{p_{cap}M_w}{RT\rho_l}} \quad (3.33)$$

mit

$\theta_{\kappa\varphi}$  Masse der Komponente  $\kappa$  in Phase  $\varphi$  in  $kg/m^3$ ,  $\theta_{\kappa\varphi} = \rho_{\varphi}X_{\kappa\varphi}$ ,

$\theta_{wg;0}$  Dampfdichte über einer ebenen Grenzfläche ( $p_{cap} = 0 \text{ MPa}$ ) in  $kg/m^3$ ,

$M_{\kappa}$  molare Masse in  $kg/mol$ ,  $M_w = 0,018 \text{ kg/mol}$ ,

$R$  universelle Gaskonstante in  $J/(mol \cdot K)$ ,  $R = 8,314 \text{ J/(mol} \cdot K)$ .

Die Gleichung (3.33) („psychrometric law“) setzt die Dampfdichte in Abhängigkeit von der Krümmung der Grenzfläche zwischen Flüssig- und Gasphase in einer Pore und damit in Abhängigkeit des Kapillardrucks.

Zur Zustandsbestimmung von Luft kann in C\_B die allgemeine Gasgleichung verwendet werden. *Miehe et al. (2010)* zufolge ist diese Gleichung in C\_B auch für Wasserdampf einsetzbar. Für die Partialdrücke  $p_{\kappa g}$  der beiden genannten Komponenten in der Gasphase, zu deren Bestimmung definitionsgemäß die Masse  $m_{\kappa g}$  der jeweiligen Komponente zu einem Referenzvolumen  $V_g$  der gesamten Gasphase in Beziehung gesetzt wird, folgt wegen  $m_{\kappa g}/V_g = \theta_{\kappa g}$  aus dem Ansatz der allgemeinen Gasgleichung die Beziehung  $p_{\kappa g(;0)} = \theta_{\kappa g(;0)} \cdot RT/M_{\kappa}$  sowohl für den Ist-Zustand wie auch für den Referenzwert bei einer ebenen Wasseroberfläche (Index 0). Die linke Seite von Gleichung (3.33) entspricht in diesem Fall der relativen Luftfeuchte  $rF(T) = p_{wg}/p_{wg;0}(T)$ .

- Im Hinblick auf die TH→M-Kopplung ist in *UPC (2017a)* für das bereits genannte Modell für Tongestein mit Schädigungsberücksichtigung („damage-elastoplastic model for argillaceous rocks“) als Option die Gleichung (3.23) zur Bestimmung der effektiven mechanischen Spannungen nach *Biot* angegeben, und auch der in den Parametertabellen zu anderen Stoffmodellen auftretende *Biot*-Koeffizient deutet an, dass diese Option mehrfach zur Verfügung steht. Ebenfalls ist in C\_B die Berücksichtigung von thermischen Verzerrungen gemäß Gleichung (3.24) möglich. Im Hinblick auf die M→H-Kopplung sind in C\_B ausgehend von der nach Gleichung (3.31) adaptierten Porosität unterschiedliche Porositäts-Permeabilitäts-Beziehungen einsetzbar, darunter auch eine exponentielle Beziehung gemäß der in *Rutqvist et al. (2002)* für TOUGH-FLAC angegebenen Gleichung (3.28).
- C\_B unterstützt eine Vielzahl mechanischer Stoffmodelle für elastoplastische und viskoplastische Prozesse, von denen die meisten jedoch von komplexerer Natur und damit für das Benchmarking eher ungeeignet sind. Das genannte Modell für Tongestein mit Schädigungsberücksichtigung, das unterschiedliche Ansätze für die einzelnen Prozesse unterstützt und daher eine Vielzahl von Materialparametern und Stellschrauben umfasst, kann allerdings hinsichtlich der Prozesse auch eingeschränkt werden z.B. durch Abschalten der Schädigungsprozesse, und es erlaubt auf diese Weise Vergleiche mit anderen Simulatoren. Auf diese Weise sind Modellierungen von Geomaterialien mit den Stoffmodellen nach *Hooke* auch unter Schichtungsberücksichtigung, nach *Mohr/Coulomb* mit assoziierter Fließregel in Gleichung (3.8) ( $\psi = \varphi$  bzw.  $Q^p = F^p$ ) oder nach *Hoek/Brown*, aber auch mit dem modifizierten *Cam-Clay*-Modell oder dem darauf basierenden *Barcelona*



*Basic Model (BBM)*, welches Quellungs- und Schrumpfungsprozesse berücksichtigt, möglich.

An viskosen Stoffmodellen kann in C\_B gemäß *Wieczorek et al. (2014)* auch das Kriechmodell *BGRa* aus *Hunsche & Hampel (1999)* verwendet werden, welches in tensorieller Form durch Gleichung (3.34) beschrieben wird (siehe z.B. *Wolters, 2014*):

$$\dot{\varepsilon}^v(\sigma_{eff}) = \frac{3}{2} A e^{-\frac{Q}{RT}} \{\sigma_{eq}\}^{n-1} \{s\} \quad (3.34)$$

mit

$A, n$  Stoffmodellparameter des Materials in  $s^{-1}$  bzw. dimensionslos,

$Q$  Aktivierungsenergie nach *Arrhenius* für temperaturabhängige Prozesse in  $J/mol$ .

Das Kriechmodell *BGRa* stellt eine temperaturabhängige Verallgemeinerung des *Norton-Kriechmodells* dar, vgl. Gleichung (3.9); letzteres kann durch Setzung von  $Q = 0 J/mol$  erhalten werden.

#### *Erfahrungen des Projektpartners GRS BS mit dem Simulator CODE\_BRIGIT*

In dem Bereich „Endlagersicherheitsforschung“ der GRS wird der Simulator C\_B seit Beginn dieses Jahrtausends (*Zhang et al., 2004*) umfassend für prädiktive und retrospektive multiphysikalische Simulationen sowohl von laborativen Untersuchungen wie auch von Feldexperimenten im Bereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle eingesetzt. Bei den Simulationen der GRS BS mit diesem Simulator sind vorwiegend Modelle mit tonigen, aber auch solche mit salinaren Wirtsgesteinstypen und Versatz-/Verschlussmaterialien (Tongestein bzw. Tonsteingebirge und Bentonit / Salinargestein bzw. -gebirge und Salzgrus) numerisch untersucht worden, siehe z.B. *Zhang et al. (2007, 2008a, 2014)*, *Jockwer & Wieczorek (2008)* und *Rothfuchs et al. (2012)*. Insbesondere sind von der GRS BS in nahezu allen In-situ-Experimenten, die von ihr in den Untertagelaboren Mont Terri und Bure im Tonsteingebirge durchgeführt worden sind, begleitende modelltheoretische Arbeiten mit C\_B erfolgt. Darüber hinaus sind von der GRS BS THM-gekoppelte Integritätsanalysen von Verschlussbauwerken im Salinargebirge im Rahmen der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) mit C\_B durchgeführt worden, *Müller-Hoeppe et al. (2012)*.



### 3.2.7 Der Simulator OpenGeoSys

Das Projekt OpenGeoSys hat zum Ziel, numerische Methoden zur Simulation von THMC-Prozessen in porösen und geklüfteten Medien zu entwickeln und zu implementieren und den auf diese Weise entstandenen und stetig weiterentwickelt werdenden Computercode gleichen Namens für die wissenschaftliche Gemeinschaft verfügbar zu machen (Open-Source-Konzept), *Kolditz et al. (2012a)*. Die Weiterentwicklung des Simulators OpenGeoSys in der Programmiersprache C++ wird dabei nicht nur am UFZ, sondern von weltweit agierenden Forschern gemeinschaftlich vorangetrieben. Die ersten Implementierungsarbeiten für den zugehörigen Computercode sowie die grundlegenden Ideen für das in den späten 2000er Jahren am Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH (UFZ) in Leipzig umgesetzte Projekt reichen bis in die Achtzigerjahre des vergangenen Jahrtausends zurück. Seine programmtechnische Grundlage ist der in den Achtziger Jahren von der Universität Hannover (UH, seit 2006 „Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover“, LUH) erarbeitete Simulator RockFlow, *Kolditz et al. (2001)*, der dort zeitweise auch nach der Abspaltung von OpenGeoSys parallel weiterentwickelt worden ist, *Kohlmeier et al. (2009)*. Durch das OpenGeoSys-Projekt sind in Kooperation der beteiligten Forscherteams mehrere Bücher mit Benchmark-Sammlungen zusammengestellt worden, die auch Abschnitte und weitere Informationen zu den zugrunde liegenden numerischen Formulierungen und den Prozessen und Phänomenen enthalten, die bei der Implementierung des Simulators OpenGeoSys umgesetzt worden sind. Für die Beschreibung der Fähigkeiten von OpenGeoSys wird in diesem Bericht auf *Kolditz et al. (2012a)*, auf die Benchmark-Bücher *Kolditz et al. (2012b, 2016)* sowie auf Informationen, die in bilateralen Fachtreffen mit den BenVaSim-Projektpartnern BGR und ENSI erhalten worden sind, zurückgegriffen.

#### *Eigenschaften und Simulationsprozess von OpenGeoSys*

Ähnlich wie bei TOUGH2 sind die Eingabedaten für eine OpenGeoSys-Simulation in strukturierten Textdateien zusammenzustellen. Das Kompilat des Simulators OpenGeoSys, das für die numerische Lösung der Modellierungsaufgabenstellungen zuständig ist, enthält aber anders als bei TOUGH2 bereits eine grafische Benutzeroberfläche, mit deren Hilfe sich zumindest die Inhalte für die weniger umfangreichen Eingangsdateien eingeben lassen. Generell können unterschiedliche Prä- und Postprozessorprogramme wie z.B. das von der BGR entwickelte Programm GINA, der kommerzielle Postprozessor Tecplot oder der Open-Source-Postprozessor



ParaView zur Zusammenstellung der Eingabedaten bzw. Auswertung der Ergebnisdaten eingesetzt werden, für die in OpenGeoSys entsprechende Schnittstellen bei der Datenein- bzw. -ausgabe implementiert sind. Die Präprozessorfunktionalitäten in GINA ermöglichen dabei auch eine visuell orientierte Eingabe der Modelldiskretisierung über Maussteuerung. Einleseschnittstellen bestehen in OpenGeoSys auch zu Datenformaten, die für die Speicherung von Luft- und Satellitenbildern verwendet werden können, wie beispielsweise das Format GeoTIFF.

OpenGeoSys erlaubt einen sukzessiven Aufbau der Modelldiskretisierung über Punkte, Linien, Flächen- und Volumenelemente. Auf diese Weise ist mit OpenGeoSys wie bereits mit CODE\_<sub>BRIGHT</sub> auch eine Simulation von Modellen mit zweidimensionalen Modellgeometrien möglich. Die Palette an einsetzbaren Volumenelementen umfasst in OpenGeoSys neben Tetra- und Hexaedern auch Dreiecksprismen und Pyramiden, so dass sich im Rahmen des BenVaSim-Projekts eine Diskretisierungstransformation zwischen FLAC<sup>3D</sup> und OpenGeoSys auf einfache Weise realisieren ließe, so sie dort als erforderlich angesehen wird.

Die TH<sup>2</sup>M-gekoppelten Differenzialgleichungen des Modells werden von OpenGeoSys mithilfe der Finite-Elemente-Methode gelöst. Für einige Prozesskopplungen kann dabei die Gleichungslösung in jedem Zeitschritt monolithisch erfolgen, während die Zustandsgrößen anderer Prozesse ggf. im Nachlauf bzw. über eine sequenzielle Kopplung berechnet werden. Die betrachteten mathematischen Gleichungen für die physikalischen Prozesse stimmen dabei an vielen Stellen mit den bisher aufgeführten Gleichungen für FLAC<sup>3D</sup>, TOUGH2 und CODE\_<sub>BRIGHT</sub> überein. Im Einzelnen kann festgestellt werden:

- Die drei Gleichungen (3.1), (3.2) und (3.3) zur Beschreibung der ablaufenden mechanischen Prozesse (Bewegungsgleichung, Verzerrungstensor, Stoffmodell) finden in OpenGeoSys auf dieselbe Weise Eingang wie bei CODE\_<sub>BRIGHT</sub> mit verschwindendem Massenträgheitsterm und ohne explizite Erwähnung eines mitrotierenden Effektivspannungstensors. Zudem wird ebenso eine veränderliche Porosität über die aus der Feststoffmassenbilanzgleichung hergeleitete Gleichung (3.31) in Betracht gezogen. Ein mechanisch transversal isotropes Materialverhalten kann in Abhängigkeit vom eingesetzten Stoffmodell simuliert werden, z.B. für ein linear-elastisches Material (Stoffmodell nach *Hooke* in transversal isotroper Form).
- Ebenso gehen die drei Gleichungen (3.10), (3.11) und (3.12) (Massenbilanz, *Darcy*- und *Fick*-Transportgleichungen, Massengehalte) prinzipiell in die Beschreibung der hydraulischen Strömungsprozesse der Gas- und der Flüssigphase ein, wobei die für OpenGeoSys

angegebenen Gleichungen für die hydraulischen Zustandsänderungen und Strömungsraten in *Lagrange*-Betrachtungsweise, d.h. mit Bezug auf die sich deformierende Feststoffmatrix, formuliert sind. Sowohl die intrinsische Permeabilität  $K$  des porösen Mediums wie auch die in OpenGeoSys verwendeten Diffusionskoeffizienten für die Phasen (entsprechen  $D_\phi/\phi S_\phi$  in den Termen von Abschnitt 3.2.3) können tensoriell dargestellt werden, d.h. eine anisotrope Modellierung der hydraulischen Transportprozesse ist in OpenGeoSys ebenfalls möglich.

- Für die Modellierung der thermischen Prozesse werden in OpenGeoSys die Gleichungen (3.13), (3.14a/b) und (3.15a/c/d) (Energiebilanz, Energiegehalt, Transportgleichungen) unter Berücksichtigung der Beziehung  $c_\phi = dh_\phi/dT$  verwendet, wobei der Prozess der Wärmestrahlung nach *Stefan/Boltzmann* auch in diesem Simulator vernachlässigt wird. Für thermische Prozesse kann ebenfalls eine tensorielle Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  angesetzt werden, d.h. auch eine thermische Anisotropie wird von OpenGeoSys bei der Modellierung unterstützt.
- Für den Kapillardruck und die Relativpermeabilitäten sind in OpenGeoSys die Beziehungen nach (*Mualem*/) *van Genuchten* und (*Burdine*/) *Brooks/Corey* gemäß den Gleichungen (3.17) bis (3.20) mit den Fixierungen  $\tilde{\epsilon} = \tilde{\gamma} = 1/2$  für die Porenverbundenheitsparameter implementiert. Darüber hinaus lassen sich mithilfe von Wertepaaren prinzipiell beliebige Kapillardruck- und Relativpermeabilitätsfunktionen für das Modell bzw. für einzelne Modellbereiche definieren, wobei die Beziehung zwischen Sättigung und Kapillardruck allerdings auch bei OpenGeoSys eineindeutig bleiben muss. Auf diese Weise sind in diesem Simulator zwar beispielsweise die Funktionen  $K_{rel;\phi} \equiv 1$  und  $K_{rel;\phi} = S_\phi$  verwendbar, die Funktion  $p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}$  hingegen nicht.
- Formeln für die Massenanteile phasenfremder Komponenten in Zweiphasenströmungsprozessen konnten in den referenzierten Quellen nicht gefunden werden. Allerdings deuten die für zwei Phasen und zwei Komponenten formulierten Fluidbilanzgleichungen im entsprechenden Kapitel 12 in *Kolditz et al. (2012b)* an, dass OpenGeoSys phasenfremde Komponenten bei den Simulationen berücksichtigt.
- Die TH→M-Kopplung kann in OpenGeoSys über die Gleichungen (3.23) und (3.24) (Effektivspannungskonzept nach *Biot*, thermische Verzerrungen) mit einem über die Fluidsättigungen gemittelten Porenmischdruck  $p = \sum_\phi S_\phi p_\phi$  erfolgen. Darüber hinaus ist in

OpenGeoSys eine Berücksichtigung von Quelldrücken, die in ähnlicher Weise wie Porendrücke die mechanische Belastung des Korngerüsts reduzieren, möglich:

$$\sigma_{eff} = \sigma_{tot} - (\alpha p + S_l p_{sw,max}) I \quad (3.35)$$

mit

$p_{sw,max}$  maximaler Quelldruck in MPa.

Speziell für Berechnungen mit variablen Sättigungen besteht auch die Option, den Einfluss des Porendrucks auf die mechanisch wirksamen Spannungen in einer Modellzone vollständig aufzuheben, sobald diese Zone nicht mehr zu 100% wassergesättigt ist. Eine Reduktion der Korngefügebelastung würde in diesem Fall in teilgesättigten Modellbereichen lediglich durch den Quelldruck erfolgen können.

Die M→H-Kopplung erfolgt in OpenGeoSys über die Porenraumänderung, die durch Gleichung (3.31) beschrieben wird.

- Auch in OpenGeoSys sind unterschiedliche mechanische Stoffmodelle für elastische, elastoplastische, viskoelastische und viskoplastische Prozesse implementiert, darunter z.B. die Stoffmodelle nach *Hooke* und *Mohr/Coulomb* (beide isotrop und transversal isotrop), *Drucker/Prager*, *Cam-Clay*, *Norton*, *Maxwell*, *Burgers* und *Lubby2*.

### *Erfahrungen der Projektpartner BGR und ENSI mit dem Simulator OpenGeoSys*

Der Fachbereich „Geotechnische Sicherheitsnachweise“ der BGR besitzt umfangreiche Erfahrungen mit unterschiedlichen Simulatoren, die bereits in vielen Projekten im Bereich der Endlagerforschung – häufig begleitend zu Feld- und laborativen Untersuchungen – zum Einsatz gebracht worden sind. Derzeit ist die BGR (auch mit anderen Fachbereichen) u.a. in den zum Teil langjährigen Projekten DECOVALEX, BASTION, AnSichT und „Task Force on Engineered Barrier Systems“ sowie in Durchführungen und Auswertungen von Feldversuchen im schweizerischen UTL Mont Terri aktiv und führt dort auch numerische Untersuchungen mit dem Simulator OpenGeoSys durch. Im Rahmen des vom BMWi geförderten laufenden Verbundprojekts AnSichT, das eine Prüfung und Weiterentwicklung der Methodik einer Sicherheitsnachweisführung zum Ziel hat, sind hier beispielsweise Testsimulationen erfolgt in Vorbereitung auf zu einem späteren Zeitpunkt im Projekt geplante Integritätsberechnungen an generischen Endlagerbergwerken, *Maßmann et al. (2013)*. Im Rahmen des CD-Experiments



(„cyclic deformation“) im UTL Mont Terri wurde das durch saisonale Ent- und Wiederaufsättigungszyklen induzierte  $H^1M$ -Deformations- und Entfestigungsverhalten in einer unverbauten Tunnelnische untersucht und mit OpenGeoSys simuliert, *Ziefle et al. (2017)*.

Bedingt durch die Entwicklungsgeschichte des Simulators RockFlow, der die Grundlage für den Simulator OpenGeoSys bildet, bestehen bei der BGR langjährige Erfahrungen mit beiden genannten Simulatoren. Zusammen in einem Team mit den Universitäten in Hannover und Tübingen („Eberhard Karls Universität Tübingen“, UT) ist die BGR im Jahr 2000 in das dritte DECOVALEX-Projekt eingestiegen, in dem das Team im Rahmen der beiden Aufgaben 1 und 3/BMT1B („Tasks“) numerische Simulationen zum multiphysikalischen Verhalten im Nahfeld von mit Bentonit versetzten Einlagerungshohlräumen im Kristallingestein mit RockFlow durchgeführt hat, *Alonso & Alcoverro (2005)*, *Nguyen et al. (2005)*. Dabei ist von der BGR im Rahmen des Tasks 1 für den In-situ-Erhitzerversuch FEBEX in der schweizerischen Lokation Grimsel im Wesentlichen das  $TH^2$ -Verhalten des Nahfelds auf sequenzielle Weise, d.h. mit einseitiger Kopplung von einem  $TH^1$ -Modell des gesamten Nahfelds auf ein  $H^2$ -Modell des Bentonitversatzes, mit RockFlow simuliert worden. An weiteren Phasen des DECOVALEX-Projekts hat sich die BGR zunächst nur fördernd (DECOVALEX-THMC), später aber auch wieder operativ (DECOVALEX-2015 und -2019) in Zusammenarbeit mit dem UFZ, das den Simulator OpenGeoSys weiterentwickelt, beteiligt, *Rejeb et al. (2008)*, *Sugita et al. (2016)*.

Seit der Phase DECOVALEX-2015 nimmt neben der BGR auch das ENSI an dem internationalen Benchmarking-Projekt teil und hat sich am Task B1 mit rechnerischen Simulationen des THM-Verhaltens einer Bentonitsäule (laborative Untersuchungen an einem zylindrischen, mit Bentonit gefüllten Behälter) und der Erhitzerexperimente HE-D und HE-E im UTL Mont Terri beteiligt, *Garitte et al. (2016)*. Das ENSI hat die Benchmarkberechnungen dabei wie auch das Team des UFZ mit dem Simulator OpenGeoSys durchgeführt. Da bei diesem Benchmarking aber jedem teilnehmenden Team die Herangehensweise an die Modellierung abgesehen von technischen Daten und Abmessungen freigestellt ist, sind beide Teams bei den Simulationen zu unterschiedlichen Ergebnissen gelangt, die sich dabei jedoch in einem trotz der Unterschiede insgesamt akzeptablen Rahmen bewegen.



### 3.2.8 Der Simulator COMSOL Multiphysics

Bei COMSOL Multiphysics (in diesem Abschnitt nachfolgend aufgrund der häufigen Benennung mit „CM“ abgekürzt) handelt es sich um ein umfassendes, modular aufgebautes Softwarepaket, das für physikalische Simulationen der unterschiedlichsten Arten eingesetzt werden kann. Das im Jahr 1998 unter dem Namen FEMLAB kommerziell veröffentlichte Softwarepaket, das zu Beginn lediglich ein Strukturmechanikmodul beinhaltete, ist seither insbesondere seit seiner Umbenennung in der Mitte der 2000erjahre beständig um integrierte und optionale Module erweitert worden, wobei unter letzteren auch das Geomechanikmodul, das Untergrundströmungsmodul und das Wärmeübertragungsmodul fallen. Jährlich organisiert das herstellende schwedische Unternehmen COMSOL AB mehrere Konferenzen an weltweiten Orten, auf denen CM-Anwender ihre Resultate präsentieren. Die im vorliegenden Bericht genannten Informationen über mit CM modellierbare Prozesse stammen vorwiegend aus dem Softwarehandbuch *COMSOL (2012)* sowie aus der auf einem bilateralen Fachtreffen erfolgten Simulatorvorstellung des BenVaSim-Projektpartners ENSI. Spezielle Handbücher zu den oben genannten optionalen Modulen haben bei der TUC jedoch nicht vorgelegen, so dass einige Details zur geomechanischen Modellierung und zur Modellierung von Zweiphasenströmungsprozessen in CM der TUC bis dato nicht bekannt sind.

#### *Eigenschaften und Simulationsprozess von COMSOL Multiphysics*

Der Simulator CM beinhaltet durch seine grafische Benutzeroberfläche mit umfassenden visuellen Einstell- und Darstellungsmöglichkeiten sowohl einen Prä- wie auch einen Postprozessor; Schnittstellen bestehen darüber hinaus zu unterschiedlichen CAD-Programmen, MATLAB und Excel. Modellierungs- und Simulationsabläufe können in CM gleichwohl auch durch Skripte gesteuert werden, so dass für den Benutzer ein Neustart einer bereits erfolgten, möglicherweise abgebrochenen oder abgestürzten Simulation mit adaptierten Rahmenbedingungen ohne großen Aufwand durchführbar ist. Generell sind mit CM Modelle mit drei-, zwei-, ein- und auch null-dimensionalen Modellgeometrien simulierbar, wobei sich die letzteren laut Handbuch für physikalisch-chemische Systeme mit räumlich homogener Struktur beispielsweise im Zusammenhang mit chemischen Reaktionen anwenden lassen. Die Grundformen für Zonen in 3D-Modellen sind in CM Hexaeder, Tetraeder, Pyramide und Dreiecksprisma, d.h. bei Bedarf wäre eine



übliche Modelldiskretisierung aus  $FLAC^{3D}$  (d.h. ohne Zonen der Grundform „degenerierter Hexaeder“) über eine passende Schnittstelle in eine Diskretisierung für CM ohne Unterteilung oder Umwandlung von Modellzonen überführbar.

Die möglichen Anwendungsbereiche von CM erstrecken sich von der Simulation elektromagnetischer Vorgänge (z.B. in Halbleiterbauteilen oder optischen Komponenten) über die Simulation akustischer und chemischer Ausbreitungsvorgänge bis hin zu thermischen, hydraulischen und mechanischen Simulationen. Zudem können diese physikalischen Prozesse auf unterschiedliche Weise miteinander gekoppelt werden. Jedes der Module in CM enthält einen vordefinierten Satz partieller Differenzialgleichungen und algebraischer Gleichungen, die bei der Prozesskopplung zusammengetragen werden und auch benutzerseitig um weitere Differenzial- und/oder algebraische Gleichungen ergänzt werden können. Auf diese Weise können bei der Abbildung eines gegebenen physikalischen Modells in ein Berechnungsmodell etwa eigene mechanische Stoffmodelle, fehlende hydraulische Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen oder alternative Gleichungen für Gleichgewichtskonzentrationen phasenfremder Komponenten nachträglich manuell dem Berechnungsmodell hinzugefügt werden. Die zusammengetragenen Gleichungen werden dann von CM über eine adaptive Finite-Elemente-Methode monolithisch gelöst. Bei dem Gleichungslösungsprozess kann insbesondere bei Betrachtung hydraulisch-mechanisch gekoppelter physikalischer Prozesse auch die ALE-Methode („Arbitrary Lagrangian-Eulerian“) eingesetzt werden, mit der eine zu starke Verzerrung des Modellgitters durch große mechanische Deformationen verhindert werden kann, so dass die numerische Stabilität während der Simulation länger gewahrt bleibt.

Aus der Literaturreferenz *COMSOL (2012)* sind einige der verwendeten hydraulischen und mechanischen Ansätze und Gleichungen insbesondere hinsichtlich der optionalen Module, zu denen auch das Geomechanikmodul und das den Zweiphasenfluss beinhaltende Untergrundströmungsmodul zählen, nicht ersichtlich. Das Hauptprogramm besitzt aber mit Blick auf die TH<sup>2</sup>M-Modellierung von Endlagerkomponenten in jedem Fall die folgenden Eigenschaften:

- Die drei Wärmetransportprozesse (Konduktion, Konvektion und Radiation) sind mit CM entsprechend den Gleichungen (3.15a/b/c) modellierbar, wobei allerdings für die Konvektion in *COMSOL (2012)* keine Gleichung angegeben ist. Die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  kann dabei tensoriell für eine anisotrope Wärmeausbreitung angegeben werden. Die Energiebilanzgleichung (3.13) wird von CM unter folgender Setzung des Energieänderungsterms gelöst:

$$\frac{D\zeta_{E/V}}{Dt} = \rho c \frac{DT}{Dt} \quad (3.36)$$

Im Gegensatz zu der im thermohydraulischen Simulator TOUGH2 verwendeten Gleichung (3.14a/b) werden hier aufgrund der Berücksichtigung einer parallel erfolgenden mechanischen Deformation der Modellgeometrie die materiellen Zeitableitungen anstelle der örtlichen Zeitableitungen betrachtet. Des Weiteren wird in dieser generellen Formulierung für das Wärmeübertragungsmodul in CM der Term auf der rechten Seite von Gleichung (3.36) nicht nach den in einem porösen Medium potenziell vorhandenen unterschiedlichen Phasen untergliedert.

- Sowohl für die mechanischen wie auch für die hydraulischen Prozesse sind keine Bilanzgleichungen im Handbuch zur Version 4.3 des Simulators CM angegeben. Zwar wird von CM die *Darcy*-Gleichung verwendet, aber ihre Angabe fehlt im Handbuch ebenso und damit insbesondere die Information, ob die intrinsische Permeabilität  $K$  als Tensor eingegeben werden kann. In *Hansmann (2012)* wird allerdings für Variationsberechnungen u.a. auch eine anisotrope Permeabilität angesetzt, und aus bilateralen Gesprächen zwischen TUC und ENSI konnte in Erfahrung gebracht werden, dass von CM auch eine tensorielle Eingabe für  $K$  unterstützt wird. Eine mechanische Berücksichtigung der Transversal-Isotropie findet in entsprechenden Stoffmodellen von CM ebenso statt.
- Der Kapillardruck kann in CM über die Beziehungen nach *van Genuchten* oder *Brooks/Corey* gemäß den Gleichungen (3.17) bzw. (3.18) berechnet werden. Informationen über Beziehungen für die relativen Permeabilitäten der Fluidphasen in CM liegen bei der TUC bislang nicht vor; dasselbe gilt für Informationen über die Berücksichtigung phasenfremder Komponenten.
- Die TH→M-Kopplung kann auch in CM über die Gleichungen (3.23) und (3.24) (Effektivspannungskonzept nach *Biot*, thermische Verzerrungen) erfolgen.
- Stoffmodelle, die vom Geomechanikmodul von CM unterstützt werden, sind beispielsweise diejenigen nach *Hooke* (isotrop und transversal isotrop), *Mohr/Coulomb*, *Drucker/Prager*, *Hoek/Brown*, das modifizierte *Cam-Clay*-Modell und das Kriechmodell nach *Norton*. Gleichungen sind in *COMSOL (2012)* dabei wiederum nur für das isotrop-elastische Stoffmodell angegeben, dessen Gleichung der Gleichung (3.6) in der isotropen Formulierung – d.h. ohne Indizes für die Materialparameter und mit  $G = E/2(1 + \nu)$  – entspricht.



### *Erfahrungen des Projektpartners ENSI mit dem Simulator COMSOL Multiphysics*

Die Kernkompetenzen der Sektion „Tiefenlagerung & Sicherheitsanalysen“ des ENSI umfassen bis vor einigen Jahren hauptsächlich die Auseinandersetzung mit chemisch-hydraulisch-thermischen Prozessen im Felsgebirge im Rahmen der geologischen Tiefenlagerung radioaktiver Abfälle. Dementsprechend sind Simulationsberechnungen mit CM wie auch mit anderen Simulatoren mit dem Fokus auf THC-Prozesse erfolgt. Die Simulatoren CM und TOUGH2-EOS9nT sind in diesem Zusammenhang im Jahr 2009 vom ENSI im Rahmen eines H<sup>1</sup>C-Benchmarks zusammen mit dem schweizerischen Paul Scherrer Institut und mit Simulationsergebnissen der Nagra als Benchmark erfolgreich einer ersten Verifizierung unterzogen worden, *Lorenzo Sentís et al. (2009)*. In der Folge ist CM auch für weitere Simulationen generischer Endlagerteilstrukturen zur Gegenrechnung von Dosenfreisetzungsberechnungen der Nagra eingesetzt worden, *Hansmann et al. (2012)*.

Seit einigen Jahren sind nunmehr beim Projektpartner ENSI auch die geomechanischen Prozesse und ihre Einflüsse auf HC-Prozesse zu verstärkt untersuchten und analysierten Prozessen im Bereich der Tiefenlagerung geworden. Erfahrungen mit geomechanischen Vorgängen sind dort primär mit dem Simulator OpenGeoSys generiert worden. Zur Erhöhung der Zuverlässigkeit seiner Kontrollberechnungen ist das ENSI aber auch an der Weiterentwicklung von anderen zur Verfügung stehenden Simulationswerkzeugen in den Bereich der Geomechanik hinein interessiert, so dass derzeit unter anderem eine Anschaffung des Geomechanikmoduls von CM konkret geplant ist. Erste Simulationen eines H<sup>1</sup>M-gekoppelten Deformationsverhaltens mit dem Strukturmechanikmodul aus CM, bei denen die Absenkung von Gebirgsbereichen im Kristallgebirge oberhalb der Baustelle für den Gotthard-Basistunnel infolge von verstärkten Wasserauspressungen durch auf diese Weise geschaffene Austrittsstellen im Tunnel unter umfangreichen Parametervariationen (u.a. Ansatz erhöhter Permeabilitäten in geklüfteten Regionen) berechnet worden sind, sind im Rahmen der Dissertation eines ENSI-Mitarbeiters erfolgt, *Hansmann (2012), Löw et al. (2015)*.

### **3.2.9 Gegenüberstellung der Eigenschaften der Simulatoren**

Die in den vorstehenden Abschnitten 3.2.4 bis 3.2.8 aufgeführten Eigenschaften der im BenVaSim-Projekt einzusetzenden Simulatoren werden dem derzeitigen Kenntnisstand der TUC entsprechend in den folgenden Tabellen 3.2a/b nach physikalischen Prozessen geordnet einan-



Thermische Eigenschaften	FTK	TOUGH-FLAC / TFC	CODE_BRIGHT	OpenGeoSys	COMSOL Multiphysics
Energiebilanz	ja (3.13)	ja	ja	ja	ja
Transport	<i>Fourier</i> (Konduktion) & Konvektion (3.15a/c/d)	<i>Fourier</i> , Konv. & <i>Stefan/Boltzmann</i> (Rad.) (3.15b)	<i>Fourier</i> & Konvektion	<i>Fourier</i> & Konvektion	<i>Fourier</i> , Konvektion & <i>Stefan/Boltzmann</i>
Transversal-Isotropie	nein	Konvektion: eingeschränkt	Konduktion & Konvektion	Konduktion & Konvektion	Konduktion & Konvektion
Hydraulische Eigenschaften	FTK	TOUGH-FLAC / TFC	CODE_BRIGHT	OpenGeoSys	COMSOL Multiphysics
Massenbilanz	für Komponenten (3.10)	für Komponenten	für Komponenten, unter Berücksichtigung von $u$	für Komponenten, unter Berücksichtigung von $u$	
Transport	<i>Darcy</i> (advektiv) (3.11)	<i>Darcy</i> & <i>Fick</i> (diff.) (3.11)	<i>Darcy</i> & <i>Fick</i>	<i>Darcy</i> & <i>Fick</i>	<i>Darcy</i>
Transversal-Isotropie	nein	Advektion: eingeschränkt; Diffusion: nein	Advektion: ja; Diffusion: nein	ja	Advektion: ja
Einphasenfluss	<i>Richards</i> (3.16) (ohne TOUGH2-MP)	<i>Richards</i>	modellierbar über großen Zahlenwert für $K_{rel,g}$ ?	<i>Richards</i>	<i>Richards</i>
Ansätze für Kapillardruck (Auswahl)	<ul style="list-style-type: none"> <li><i>van Genuchten</i> (3.17)</li> <li><i>Brooks/Corey</i> (3.18)</li> <li><math>p_{cap} = p_{cap,max} S_g</math></li> <li><math>p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><i>van Genuchten</i></li> <li><math>p_{cap} = p_{cap,max} S_g</math></li> <li><math>p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><i>van Genuchten</i></li> <li><math>p_{cap} = p_{cap,max} S_g</math></li> <li><math>p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><i>van Genuchten</i></li> <li><i>Brooks/Corey</i></li> <li><math>p_{cap} = p_{cap,max} S_g</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><i>van Genuchten</i></li> <li><i>Brooks/Corey</i></li> </ul>
Ansätze für Relativpermeabilitäten (Auswahl)	<ul style="list-style-type: none"> <li><i>Mualem/van Gen.</i> (3.19)</li> <li><i>Burdine/Brooks/Co.</i> (3.20)</li> <li><math>K_{rel,\varphi} = S_\varphi</math></li> <li><math>K_{rel,\varphi} \equiv 1</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><math>M./v.G.</math> für <math>K_{rel,i}</math> (<math>\epsilon = \frac{1}{2}</math>)</li> <li><i>Burdine/Corey</i> (<math>\lambda = 2</math>)</li> <li><math>K_{rel,\varphi} = S_\varphi</math></li> <li><math>K_{rel,\varphi} \equiv 1</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><math>M./v.G.</math> für <math>K_{rel,i}</math> (<math>\epsilon = \frac{1}{2}</math>)</li> <li><i>Burdine/Brooks/Corey</i> für <math>K_{rel,i}</math></li> <li><math>K_{rel,\varphi} = S_\varphi</math></li> <li><math>K_{rel,\varphi} \equiv 1</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><i>Mual./v. Gen.</i> (<math>\epsilon = \tilde{\gamma} = \frac{1}{2}</math>)</li> <li><i>Burdine/Brooks/Corey</i></li> <li><math>K_{rel,\varphi} = S_\varphi</math></li> <li><math>K_{rel,\varphi} \equiv 1</math></li> </ul>	
phasenfremde Komponenten	<i>Henry</i> (gelöste Luft) (3.22); <i>IFC</i> (Wasserdampf) (3.21)	<i>Henry</i> ; <i>IFC</i>	<i>Henry</i> ; psychrometric law (3.33)	(werden modelliert)	

Tabelle 3.2a: Unterstützte thermische und hydraulische Gleichungen und Eigenschaften der im Benchmarking eingesetzten Simulatoren

Mechanische Eigenschaften	FTK	TOUGH-FLAC / TFC	CODE_BRIGHT	OpenGeoSys	COMSOL Multiphysics
Impulsbilanz	<i>Cauchy</i> (3.1)	<i>Cauchy</i>	<i>Cauchy</i> ohne Trägheitsterm	<i>Cauchy</i> ohne Trägheitsterm	
Porosität	konstant	exponentieller Ansatz in $\bar{\sigma}_{eff}$ (3.27)	Feststoffmassenbilanz (3.31), d.h. abhängig von $u$	Feststoffmassenbilanz, d.h. abhängig von $u$	
Transversal-Isotropie	ja (abh. vom Stoffmodell)	ja (abh. vom Stoffmodell)	damage-elastoplastic model for argillaceous rocks: ja	ja (abh. vom Stoffmodell)	ja (abh. vom Stoffmodell)
elastische und eL-plastische Stoffmodelle (Auswahl)	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <i>Hooke</i> (i, ti) (3.6)</li> <li>· <i>Mohr/Coulomb</i> (i, ti) (3.7)</li> <li>· <i>Drucker/Prager</i> (i)</li> <li>· <i>Hoek/Brown</i></li> <li>· modifiziertes <i>Cam-Clay</i></li> <li>· <i>Barcelona Basic Model</i> (i)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <i>Hooke</i> (i, ti)</li> <li>· <i>Mohr/Coulomb</i> (i, ti)</li> <li>· <i>Drucker/Prager</i> (i)</li> <li>· <i>Hoek/Brown</i></li> <li>· modifiziertes <i>Cam-Clay</i></li> <li>· <i>Barcelona Basic Model</i> (i)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <i>Hooke</i> (i, ti)</li> <li>· <i>Mohr/Coulomb</i> (i, ti)</li> <li>· <i>Drucker/Prager</i> (i)</li> <li>· <i>Cam-Clay</i></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <i>Hooke</i> (i, ti)</li> <li>· <i>Mohr/Coulomb</i></li> <li>· <i>Drucker/Prager</i></li> <li>· <i>Hoek/Brown</i></li> <li>· modifiziertes <i>Cam-Clay</i></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <i>Hooke</i> (i, ti)</li> <li>· <i>Mohr/Coulomb</i></li> <li>· <i>Drucker/Prager</i></li> <li>· <i>Hoek/Brown</i></li> <li>· modifiziertes <i>Cam-Clay</i></li> </ul>
Stoffmodelle mit viskosem Anteil (Auswahl)	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <i>Norton</i> (3.9)</li> <li>· <i>Maxwell</i></li> <li>· <i>Burgers</i></li> <li>· <i>Lubby2</i></li> <li>· <i>Lux/Wolters</i></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <i>Norton</i></li> <li>· <i>Maxwell</i></li> <li>· <i>Burgers</i></li> <li>· <i>Lubby2</i></li> <li>· <i>Lux/Wolters</i></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <i>Norton</i></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <i>Norton</i></li> <li>· <i>Maxwell</i></li> <li>· <i>Burgers</i></li> <li>· <i>Lubby2</i></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <i>Norton</i></li> </ul>
Prozesskopplungen	FTK	TOUGH-FLAC / TFC	CODE_BRIGHT	OpenGeoSys	COMSOL Multiphysics
H→M	$\sigma_{eff}$ nach <i>Biot</i> (3.23) mit $p = p_g$ oder $p = \sum_{\varphi} S_{\varphi} p_{\varphi}$	$\sigma_{eff}$ nach <i>Biot</i> mit $p = p_g$ oder $p = \sum_{\varphi} S_{\varphi} p_{\varphi}$	dam.-e/pl. model: $\sigma_{eff}$ nach <i>Biot</i> ( $p = p_l$ ) oder <i>Bishop</i>	$\sigma_{eff}$ nach <i>Biot</i> oder <i>Bishop</i>	$\sigma_{eff}$ nach <i>Biot</i>
T→M	therm. Verzerrungen (3.24)	thermische Verzerrungen	thermische Verzerrungen	thermische Verzerrungen	thermische Verzerrungen
M→H	direkt: $\varepsilon_{vol} \rightarrow p_{\varphi}, S_{\varphi}$ (3.25)	indirekt: $\varepsilon_{vol} \rightarrow \hat{q}_{m;\kappa}$ (3.26) exponent. Poro-Perm (3.28)	direkt: $D\phi/Dt \rightarrow \zeta_{m/V;\kappa}$ ; Poro-Perm z.B. exponent.	direkt: $D\phi/Dt \rightarrow \zeta_{m/V;\kappa}$	
H→T	Wärmeleitung (3.15d)	Wärmeleitung	Wärmeleitung (3.32)	Wärmeleitung	Wärmeleitung
T→H	Temperaturabhängigkeit vieler Parameter	Temperaturabhängigkeit vieler Parameter	Temperaturabhängigkeit vieler Parameter	Temperaturabhängigkeit vieler Parameter	Temperaturabhängigkeit vieler Parameter

Tabelle 3.2b: Unterstützte mechanische Gleichungen, Eigenschaften und Stoffmodelle sowie THM-Kopplungsbeziehungen der im Benchmarking eingesetzten Simulatoren

der gegenübergestellt. Auf die zugehörigen Gleichungen wird dabei aus Platzgründen nur durch die eingeklammerte Gleichungsnummer verwiesen. Die Abkürzungen „i“ und „ti“ bei den aufgezählten Stoffmodellen stehen für eine isotrope bzw. eine transversal isotrope Formulierung. Stoffmodelle oder andere Gleichungen, die nicht explizit von einem Simulator unterstützt werden, aber möglicherweise indirekt über ein anderes Stoffmodell bzw. eine andere Gleichung unter Setzung eines Materialparameters auf einen sehr großen Zahlenwert (theoretisch  $\infty$ ) abgebildet werden können, sind in graue Schrift gesetzt. Farblich hinterlegte Tabellenzellen weisen für den FTK-Simulator auf fehlende signifikante Eigenschaften oder auf Eigenschaften mit Entwicklungsbedarf hin, wobei eine rote Farbe einen vordringlichen und eine gelbe Farbe einen untergeordneten Bedarf markiert.

In den folgenden Stichpunkten wird auf einige ausgewählte Aspekte aus den Tabellen 3.2a/b insbesondere im Hinblick auf eine Weiterentwicklung des FTK-Simulators noch näher eingegangen:

- ***Mit Blick auf das Endlagerwirtsgestein Tonstein ist aufgrund der sedimentationsbedingt vorliegenden texturellen Anisotropie grundsätzlich eine transversal isotrope physikalische Modellierung der in einem Endlager und seinem geologisch-geotechnischen Nahfeld ablaufenden Vorgänge in Betracht zu ziehen vor dem Hintergrund, eine angemessen realitätsnahe und auch hinreichend zuverlässige Abbildung dieser Vorgänge zu erreichen.*** Der geschichtete Charakter sedimentärer Gesteine und Gebirgstypen hat zur Folge, dass die in ihnen enthaltenen Porenräume gerichtete Formen und Strukturen aufweisen, die eine erleichterte Fluidströmung parallel zu den Schichtungsflächen erlauben. Ebenso besitzt die geschichtete Struktur einen Einfluss auf die thermische Leitfähigkeit anisotroper Gebirgsmaterialien derart, dass die Leitfähigkeit parallel zu den Schichtungsflächen erhöht ist gegenüber der Leitfähigkeit orthogonal zur Schichtung, wie es z.B. in *Bossart & Thury (2008)* und *Garitte et al. (2014)* für die unterschiedlichen Tongesteinsarten Opalinuston, Callovo-Oxfordium-Tonstein und Boom Clay der Endlagerforschungslokationen Mont Terri, Bure (Frankreich) bzw. Mol (Belgien) ersehen werden kann.

Der FTK-Simulator besitzt in dieser Hinsicht noch Defizite in der Modellierung thermisch und hydraulisch anisotroper Prozesse, die für eine adäquate rechnerische Simulation des TH<sup>2</sup>M-Verhaltens eines Endlagers zu beheben sind. Die Implementierung der vollständigen Berücksichtigung der thermischen und hydraulischen Anisotropien in den



FTK-Simulator und insbesondere in TOUGH2-MP wird dabei von der TUC als sehr zeitaufwändig eingeschätzt. Hier wäre grundsätzlich eine gemeinsame Weiterentwicklung mit dem LBNL anzustreben.

- Thermische Transportprozesse werden von den beteiligten Simulatoren abgesehen von den zum Teil fehlenden Möglichkeiten zur Modellierung einer thermischen Transversal-Isotropie hinreichend unterstützt. Wärmeübertragung durch Wärmestrahlung wird den anderen Wärmeausbreitungsprozessen gegenüber als vernachlässigbar eingeschätzt, so dass eine Weiterentwicklung am FTK-Simulator zur Einbeziehung des in TOUGH2 bereits enthaltenen *Stefan/Boltzmann*-Gesetzes gemäß Gleichung (3.15b) zwar auf einfache Weise implementierbar ist, allerdings im Hinblick auf andere mögliche Weiterentwicklungen des FTK-Simulators als untergeordnet eingestuft wird.
- Im Gegensatz zum im FTK-Simulator fehlenden thermischen Transportprozess kann sich der dort fehlende hydraulische Transportprozess der molekularen Diffusion als hochrelevant herausstellen. ***Die durch Konzentrationsgradienten bzw. indirekt auch durch Massenanteilsgradienten gesteuerten diffusiven Ausbreitungsprozesse für in der Flüssigphase gelöste Gase und insbesondere für Wasserdampf in der Gasphase können im Fall von (noch) geringfügig ausgeprägten Porendruckgradienten die primäre Ausbreitungsart für die beiden Fluide darstellen.*** Temperaturen in der Nähe des Siedepunktes für Wasser in der Umgebung der Abfallbehälter erzeugen etwa signifikant erhöhte relative Luftfeuchtigkeiten und damit signifikant erhöhte Massenanteile  $X_{wg}$  des Wasserdampfes innerhalb der Gasphase und auch entsprechend erhöhte Gradienten  $\nabla X_{wg}$ , die nach der Transportgleichung (3.11) zu einem deutlich ansteigenden diffusiven Abstrom von Wasserdampf und damit zu Entsättigungsprozessen in der Nähe der Abfallbehälter auch schon bei Temperaturen unterhalb von 100°C führen. Über Gleichung (3.21) werden hierbei beispielsweise die Temperatur-Dampfmasseanteil-Paare  $(T; X_{wg}) = (80^\circ\text{C}; 35,41\%), (90^\circ\text{C}; 58,38\%)$  und  $(95^\circ\text{C}; 75,86\%)$  mit den Parametern aus der Implementierung dieser Gleichung aus *IFC (1967)* in TOUGH2 erhalten.

Der Prozess der molekularen Diffusion kann aufgrund seiner Verfügbarkeit in TOUGH2 analog zu dem der Wärmestrahlung auf einfache Weise in den FTK-Simulator implementiert werden. In *Zhao (2017)* konnte eine Berücksichtigung der Diffusionsprozesse in ei-



nem Berechnungsmodell bereits erfolgreich getestet werden, wobei die Prozessimplementierung in den FTK-Simulator lediglich modellspezifisch erfolgt ist und somit noch zu generalisieren ist.

- Für die Einphasenflussbeispiele in Stufe 1 des Benchmarkings, die dem Abgleich der Simulationsergebnisse mit analytischen Lösungen dienen, wird im FTK-Simulator auf das Modul EOS9 zurückgegriffen, bei dem die Einphasenströmung mit der *Richards*-Gleichung (3.16) modelliert wird, die entsprechend der vorangegangenen Simulatorenrecherche auch von fast allen anderen beteiligten Simulatoren unterstützt wird. Die Durchführung von Einphasenströmungsberechnungen in einem teilgesättigten Medium mit dem Simulator CODE\_BRIGTH kann nach der in diesem Vorprojekt erfolgten Literaturrecherche bei Nichtvorhandensein des *Richards*-Strömungsmodells möglicherweise mit einem hydraulischen Zweiphasenströmungsmodell unter dem Ansatz einer sehr hohen Gaspermeabilität geschehen, wobei allerdings nicht ausgeschlossen ist, dass numerische Schwierigkeiten auftreten können.
- Das Vorhandensein mehrerer gängiger sowie einfacher Gleichungen für die Kapillardrücke und für die Relativpermeabilitäten in den beteiligten Simulatoren bietet hinreichende Wahlmöglichkeiten für einen Einsatz derartiger Gleichungen in den Modellbeispielen und Berechnungsvariationen. Je nach Möglichkeiten und Bedarf seitens der Projektpartner können ggf. fehlende einfache Gleichungen nachimplementiert werden, um einen Vergleich von Berechnungsergebnissen mit einer analytischen Lösung zur Zweiphasenströmung zu gestatten.
- Bei Berechnungen mit dem Simulator FLAC<sup>3D</sup> bleibt die Porosität konstant, wenn nicht seitens des Benutzers spezielle Funktionen zur dynamischen Anpassung der Porosität wie z.B. die in TOUGH-FLAC optional verwendbare Gleichung (3.27) implementiert werden. Eine für die HM-Kopplung relevante Veränderung des Porenraumvolumens in einer Modellzone wird in FLAC<sup>3D</sup> somit standardmäßig durch die Volumenverzerrung der gesamten Modellzone induziert, wobei die Feststoffmasse erhalten bleibt (d.h. indirekt wird damit auch die Korndichte des Geomaterials geändert, wenngleich sie in FLAC<sup>3D</sup> nicht explizit mitberechnet wird). Bei den Simulatoren CODE\_BRIGTH und OpenGeoSys hingegen ist eine Porositätsänderung während einer Berechnung erlaubt und wird physikalisch durch Gleichung (3.31) modelliert, die die Porositätsänderung mit der Deformationsgeschwindigkeit und der Änderung der Korndichte in Beziehung setzt. Um bewerten



zu können, inwieweit diese unterschiedlichen Vorgehensweisen zur Berechnung der Änderung des Porenraumvolumens einen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse haben, erscheint es sinnvoll, eine Porositätsänderungsbeziehung entsprechend Gleichung (3.31) in den FTK-Simulator zu integrieren – insbesondere für den Fall, dass sich die Korndichte in den Simulatoren CODE\_BRIGTH und OpenGeoSys während einer Berechnung tatsächlich nicht ändert.

Eine Adaption der Porosität kann in FLAC<sup>3D</sup> mithilfe von FISH-Funktionen durchgeführt werden, wobei die dann im FTK-Simulator erforderliche manuelle Neuberechnung der Porendrücke und Sättigungen wiederum an die veränderte Porosität anzupassen ist. Numerische Schwierigkeiten bei der HM-gekoppelten Kräfteausbalancierung infolge von zu starken Oszillationen in den Zustandsgrößen (numerische Divergenz des Lösungsverfahrens) können dabei möglicherweise die Folge sein.

- Das Vorhandensein mehrerer elastischer/elastoplastischer Stoffmodelle und von Stoffmodellen mit viskosem Anteil in den beteiligten Simulatoren bietet generell hinreichende Wahlmöglichkeiten für einen Einsatz derartiger Stoffmodelle in den Modellbeispielen und Berechnungsvariationen. Im Hinblick auf die Stoffmodelle mit viskosem Anteil beschränken sich die Wahlmöglichkeiten allerdings für CODE\_BRIGTH und COMSOL Multiphysics augenscheinlich auf das Stoffmodell nach *Norton*.
- Das Effektivspannungskonzept nach *Biot* wird grundsätzlich von allen Simulatoren bei der H→M-Prozesskopplung unterstützt. Unterschiede bestehen dabei allerdings in der Extrapolation des *Biot*-Konzepts von gesättigtem Material auf teilgesättigtes Material. Bei mehreren Simulatoren lässt sich hierbei ein extrapoliertes *Biot*-Konzept über einen äquivalenten Porendruck  $p$  (Porenmischdruck) formulieren.

Im FTK-Simulator sind zwei Optionen zur Berechnung von  $p$  aus den Porendrücken der beiden Phasen enthalten. Sie können für vergleichende Berechnungen um Optionen aus den anderen beteiligten Simulatoren ergänzt werden.

- Wird wie vorstehend beschrieben eine Porositätsänderungsgleichung in den FTK-Simulator einbezogen, kann des Weiteren auf die veränderliche Porosität aufbauend die Implementierung einer Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung im Rahmen der M→H-Prozesskopplung für Vergleichsberechnungen mit den Simulatoren TOUGH-FLAC und CODE\_BRIGTH erfolgen.



- In Kopplungen mit thermischen Prozessen scheinen keine signifikanten Unterschiede zwischen den Simulatoren zu bestehen.

Aus der Gegenüberstellung der am BenVaSim-Projekt beteiligten Simulatoren lassen sich damit zusammenfassend die folgenden für eine Endlagersystemmodellierung und -simulation relevanten Weiterentwicklungsoptionen für den FTK-Simulator ableiten:

- (1) Berücksichtigung der Anisotropie hydraulischer und thermischer Strömungsprozesse,
- (2) Berücksichtigung molekularer Diffusionsprozesse der Komponenten in beiden Phasen,
- (3) adäquate Adaption des Effektivspannungskonzepts nach *Biot* für teilgesättigte Modellbereiche sowie
- (4) Implementierung von Optionen zur Berücksichtigung von Beziehungen für die mechanisch induzierte Porositäts- und ggf. Permeabilitätsentwicklung.



## 4 Zur Weiterentwicklung des FTK-Simulators im Hinblick auf eine Effizienzsteigerung insbesondere für größere Berechnungsmodelle

### 4.1 Motivationen für die Weiterentwicklung des FTK-Simulators

Im Rahmen des ENTRIA-Teilprojekts des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik der TUC (im vorliegenden Abschnitt 4.1 mit LfD&G abgekürzt zur Unterscheidung vom Institut für Endlagerforschung der TUC) sind von diesem Lehrstuhl umfangreiche Berechnungsvariationen zur Analyse unterschiedlicher Szenarien zum Verhalten generischer Endlagerbergwerke im Salinar- und im Tonsteingebirge aufgestellt worden, *Lux et al. (2018)*. Die Simulationsarbeiten im ENTRIA-Teilprojekt des LfD&G haben dabei zum Ziel, das hydraulische Strömungsverhalten im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (EWG) des Endlagerbergwerks für die unterschiedlichen Szenarien zu charakterisieren und an den Übergangsstellen des EWG zum weiteren Teilbereich der Lithosphäre zwischen EWG und Biosphäre zu quantifizieren. Im Anschluss an die Simulationen des LfD&G sind vom Institut für Endlagerforschung der TUC auf die Ergebnisse des LfD&G aufbauende weiterführende Berechnungen zur Ausbreitung von Radionukliden vom Endlager in Richtung der Biosphäre durchgeführt worden.

Für aussagekräftige Berechnungen sind vom LfD&G dreidimensionale Berechnungsmodelle zu den aufgestellten Endlagerszenarien erstellt worden, die bereits mit Blick auf die bis dato gewonnenen Erfahrungen mit dem FTK-Simulator hinsichtlich der Berechnungsdauer (siehe dazu auch die Ausführungen in Abschnitt 3.2.4) eine eher grobe Diskretisierung zugewiesen bekommen haben – vergleichbar mit den Vorgehensweisen anderer Forschungsorganisationen zur physikalischen Modellierung und numerischen Simulation großräumiger Endlagerbergwerke. Bei der Durchführung erster Simulationen zu den Endlagerszenarien konnte aufgrund der gleichwohl noch sehr großen Zonenanzahl des Berechnungsmodells erwartungsgemäß auch sehr schnell festgestellt werden, dass diese Simulationen mit dem FTK-Simulator in der Version 2 mehrere Wochen bis Monate realer Zeit beanspruchen. Wenngleich wie in Abschnitt 3.2.4 beschrieben die mechanischen Teilsimulationen in  $FLAC^{3D}$  und die FTK-interne Interkommunikation zwischen den beiden Simulatoren  $FLAC^{3D}$  und TOUGH2 einen gesteigerten rechnerischen Aufwand benötigen, so konnte bei den 3D-Berechnungsmodellen aber auch festgestellt werden, dass der rechnerische Aufwand in TOUGH2 für die thermohydraulischen Teilsimulationen durch die aufgrund der vielen dezentral verteilten Gas- und Wärmequellen räumlich und zeitlich komplexere Prozessstruktur ebenfalls in die Höhe getrieben worden ist. Insbesondere nach der Reduzierung des gesteigerten mechanischen Berechnungsaufwands und des



Interkommunikationsaufwands zwischen FLAC<sup>3D</sup> und TOUGH2, der sich aus der Verwendung eines viskosen mechanischen Stoffmodells ergibt, durch den Ansatz des in Abschnitt 3.2.4 beschriebenen Konvergenz-Funktionalmodells benötigen nun die Teilsimulationen in TOUGH2 signifikantere Anteile an der gesamten Simulationsdauer. Bei den Simulationen mit Tonstein als Wirtsgestein sind für die mechanischen Teilprozesse bereits von vornherein weniger lange Simulationsdauern im Vergleich zum salinaren Wirtsgestein erforderlich gewesen.

Auch im BenVaSim-Projekt ist im Rahmen der dritten Stufe geplant, mit den eingesetzten Simulatoren verifizierende Berechnungen an einem dreidimensionalen Modell durchzuführen und die Berechnungsergebnisse einander gegenüberzustellen. Die konkreten Ausgestaltungen der Modellbeispiele für Stufe 3 und auch für ein finales Validierungsmodell in Stufe 4 sind im Verlauf des BenVaSim-Hauptprojekts zusammen mit allen Projektpartnern vorzunehmen. Dabei ist es durchaus möglich, dass ebenfalls für die vierte Projektstufe ein Modellbeispiel mit hinreichend erhöhter Komplexität erarbeitet werden wird, für das der Einsatz eines effizienteren FTK-Simulators von großem Vorteil ist.

#### **4.2 Der parallelisierte Simulator TOUGH2-MP**

Der Simulator TOUGH2-MP (Massively Parallelized) bietet aus der Modellierungsperspektive heraus im Grundsatz dieselben Funktionalitäten wie sein nicht parallelisiertes Pendant, die bereits im Abschnitt 3.2.3 erläutert worden sind. Unterschiede zu TOUGH2 sind somit im Wesentlichen in der programmiertechnischen Umsetzung des Lösungsalgorithmus, also insbesondere im Fortran-Quellcode der beiden Simulatoren zu finden. TOUGH2-MP ist zu Beginn des vergangenen Jahrtausends am LBNL in der Programmiersprache Fortran 90 auf der Grundlage des bestehenden, in Fortran 77 verfassten Quellcodes von TOUGH2 programmiert und später erweitert worden, und die in diesem Bericht angeführten Informationen über TOUGH2-MP und seine Funktionsweise stammen aus dem Benutzerhandbuch *Zhang et al. (2008b)* sowie aus dem Quellcode des Simulators. Beim BenVaSim-Projektpartner TUC besteht derzeit Zugriff auf den Quellcode zur Version 2.01 von TOUGH2-MP, die unter anderem das Einphasenflussmodul EOS9 nicht mehr beinhaltet.

Neben der Umstellung auf Fortran 90 und den eigentlichen Weiterentwicklungen am Quellcode sind in TOUGH2-MP auch Einbeziehungen bereits existierender und bewährter externer Programmibliotheken mit Funktionen für unterschiedliche grundlegende programmiertechnische



Aufgaben innerhalb der Parallelisierung numerischer Gleichungslöser erfolgt, die vom Benutzer vorab zu beschaffen (Download von den jeweiligen Herstellerwebseiten) und dann zur Kompilierung von TOUGH2-MP innerhalb der Entwicklungsumgebung in das TOUGH2-MP-Programm einzubinden sind:

- die in der Programmiersprache C verfasste METIS-Bibliothek mit Funktionen zur Aufteilung von Modelldiskretisierungen auf mehrere, jeweils in sich zusammenhängende Teildiskretisierungen, *Karypis (2013)*,
- die in der Programmiersprache Fortran verfasste Aztec-Bibliothek mit Funktionen zur parallelisierten Lösung linearer Gleichungssysteme, *Tuminaro et al. (1999)*,
- die in der Programmiersprache Fortran verfasste BLAS-Bibliothek (Basic Linear Algebra Subprograms) mit Funktionen für grundlegende linear-algebraische Operationen auf Matrizen und Vektoren sowie
- eine Implementierung des MPI-Standards (Message-Passing Interface, *Message Passing Interface Forum, 2012*) wie z.B. MPICH zur Interkommunikation zwischen parallelisierten Prozessen.

Beim Start von TOUGH2-MP wird die vom Benutzer spezifizierte Anzahl von parallel ablaufenden Prozessen erzeugt, von denen ein Prozess als Masterprozess designiert ist, der die Eingabedaten aus den TOUGH2-MP-Eingangsdateien MESH, INCON, GENER und INFILE bzw. EINGABE (von der TUC für den FTK-Simulator aus Konsistenzgründen zu ihren Modifikationen an TOUGH2 umbenannt) einliest. Mithilfe von Funktionen aus der METIS-Programm-bibliothek wird vom Masterprozess dann das Berechnungsmodell in eine Anzahl von Teilgebieten in Höhe der Anzahl der erzeugten Prozesse unterteilt. Mithilfe von MPI-Funktionen werden dann jedem anderen Prozess die Daten zu einem unterschiedlichen Teilgebiet übermittelt. Die Daten zu dem verbleibenden Teilgebiet bleiben beim Masterprozess. Jeder Prozess bearbeitet daraufhin das ihm zugewiesene Teilgebiet durch die Zusammenstellung der lokalen *Newton*-Verfahrensgleichungen, die Lösung der lokalen linearen Gleichungssysteme mithilfe der Bibliotheken Aztec und BLAS sowie die Aktualisierung des in dem Teilgebiet vorherrschenden thermohydraulischen Zustands für die zu simulierende Zeitspanne, wobei eine Interprozesskommunikation mit Blick auf benachbarte, aber unterschiedlichen Prozessen zugewiesene Modellzonen regelmäßig in jedem *Newton*-Iterationsschritt des Gleichungslösungsprozesses erfolgt. Sind alle Prozesse am Ende ihrer jeweiligen Berechnung angelangt, werden die für



ihr Teilgebiet berechneten Primärvariablen und Porositäten von ihnen zurück an den Masterprozess übermittelt. Der Masterprozess bringt die genannten Daten, die sich allesamt auf Modellzonen beziehen, dann in die ursprüngliche Reihenfolge der entsprechenden Modellzonen und schreibt diese Daten sowie ein Protokoll zur erfolgten Berechnung schließlich in die TOUGH2-MP-Ausgangsdateien `SAVE` und `OUTPUT` bzw. `AUSGABE` (ebenfalls von der TUC aus Konsistenzgründen umbenannt). Die Strukturen der Dateien `MESH`, `INCON`, `GENER`, `IN-FILE/EINGABE` und `OUTPUT/AUSGABE` haben sich dabei im Vergleich zu TOUGH2 nicht bedeutsam verändert. Unterschiedlich zu TOUGH2 ist allerdings, dass bei TOUGH2-MP weitere berechnete Daten von jedem Prozess separat und damit im Hinblick auf das gesamte Berechnungsmodell auf unsortierte Weise ausgegeben werden. Insbesondere werden die Zeitreihen von jedem Prozess in eine ihm zugeordnete Ausgabedatei `FOFT_P` mit der Prozessnummer mit führenden Nullen als Dateiendung geschrieben und nicht wie in TOUGH2 aufgeteilt nach Daten zu Zonen, zu Verbindungen und zu Quelltermen (Dateien `FOFT`, `COFT` bzw. `GOFT`). Die Tatsache, dass bei einer Programmausführung von TOUGH2-MP somit nur die wenigsten Daten auf eine Weise strukturiert vorliegen wie es in TOUGH2 der Fall ist, ist bei der auf die Kopplung mit TOUGH2-MP ausgerichteten Erweiterung des FTK-Simulators mit Blick auf die FTK-Einlesefunktionen unter den bisher erfolgten Adaptionen der TUC am Quellcode von TOUGH2 zu berücksichtigen gewesen.

Ein weiterer Unterschied von TOUGH2-MP zu TOUGH2 besteht durch die Umstellung des Quellcodes von der Programmiersprachenversion Fortran 77 auf die Version Fortran 90, mit der das LBNL insbesondere den benötigten Arbeitsspeicherplatz signifikant verringern konnte. Für die Verwendung des Simulators TOUGH2 sind vor der Kompilierung des Quellcodes die maximalen Felddimensionen insbesondere für die zahlreichen zonen- oder verbindungsbezogenen Feldvariablen festzulegen, und infolgedessen werden bei der Ausführung des kompilierten Simulators entsprechend umfängliche Speicherplatzanforderungen an das Betriebssystem des Rechners gestellt – unabhängig von der tatsächlichen Zonenanzahl im Berechnungsmodell. Hingegen werden in TOUGH2-MP die Dimensionen der Feldvariablen für potenziell umfänglichere Datenmengen dynamisch anhand der tatsächlichen Zonenanzahl des Berechnungsmodells bestimmt. Dieser Vorgang schließt auch die Feldvariablen für Materialparameter ein, d.h. die Anzahl der vorhandenen Materialgruppen wird von TOUGH2-MP ebenfalls dynamisch ermittelt und ist nicht mit der in TOUGH2 implementierten Obergrenze von 26 beschränkt.



Durch die Verwendung der externen Bibliotheken brauchten viele Funktionen, die für die parallelisierte Ausführung von TOUGH2-MP erforderlich sind, nicht im Quellcode von TOUGH2-MP definiert zu werden. Dennoch sind die Unterschiede zwischen den Quellcodes von TOUGH2 und von TOUGH2-MP äußerst umfangreich, was zu einem beachtlichen Anteil auch der trotz der Verwendung der Bibliotheken noch sehr hohen Anzahl an Funktionsaufrufen zur Einrichtung und Verwaltung der Parallelisierung in TOUGH2-MP geschuldet ist. Als augenfälligstes Beispiel kann die Funktion `CYCIT` zur Durchführung der zeitlichen Simulation genannt werden, die in TOUGH2-MP auch viele Funktionsaufrufe zur vorangehenden Einrichtung der Parallelisierung enthält und nach Abzug aller Kommentar- und Leerzeilen 1.131 Zeilen umfasst, während die entsprechende Funktion in TOUGH2 auf dieselbe Weise gekürzt lediglich 173 Zeilen enthält. Weitere umfänglichere Unterschiede zwischen den Quellcodes von TOUGH2 und TOUGH2-MP sind durch die Umstellung von Fortran 77 auf Fortran 90 generiert worden und hier insbesondere durch die damit erforderlich gewordenen Funktionen für Speicherplatzallozierungen für die dynamischen Feldvariablen und durch den Einsatz von sogenannten Modulen zur Definition von globalen Variablen und Feldern (bei diesen Modulen handelt es sich um ein Fortran-Konstrukt, und sie sind nicht zu verwechseln mit den EOS-Modulen von TOUGH2). Vereinfachungen konnten im Quellcode von TOUGH2-MP hingegen bei den Codepassagen zu den Lösern linearer Gleichungssysteme vorgenommen werden, da mit der Einbeziehung der Aztec-Bibliothek im Quellcode von TOUGH2-MP nun lediglich die entsprechende Bibliotheksfunktion aufzurufen und deren korrekte Funktionsweise zu überprüfen ist.

### **4.3 Erweiterung der FTK-Simulatorenkopplung auf TOUGH2-MP**

Vor den eigentlichen Arbeiten zur Erweiterung des FTK-Simulators und zur damit verbundenen Modifikation des Quellcodes von TOUGH2-MP ist zunächst aufgrund seiner im vorangehenden Abschnitt beschriebenen umfangreichen Unterschiede zum Quellcode von TOUGH2 eine Einarbeitung in die veränderten Strukturen des Quellcodes von TOUGH2-MP erforderlich gewesen. In Verbindung mit der Einarbeitung in den Quellcode sind auch stellenweise Editierungen zur verbesserten Lesbarkeit und Bearbeitbarkeit erfolgt mit Blick auf die geplanten Erweiterungen der entsprechenden Codepassagen zur verbesserten Interaktion mit FLAC<sup>3D</sup> und den bereits existierenden FTK-Funktionen. Im Rahmen der Editierungen sind von der TUC auch zwei kleine Bugfixes im Quellcode von TOUGH2-MP vorgenommen worden (deren Ignorie-

rung aber nicht zu falschen Berechnungsergebnissen führen würde, sondern ggf. zu Programmabbrüchen), und auch der auf den Webseiten des LBNL genannte Bugfix für die Aztec-Bibliothek ist von der TUC in den entsprechenden Quellcode eingebaut worden. Zudem ist es in der an der TUC vorliegenden Entwicklungsumgebung erforderlich gewesen, drei Wrapperfunktionen zum Aufruf von METIS-Bibliotheksfunktionen aus einem Fortran-Programm heraus jeweils ein zweites Mal unter veränderten Funktionsnamen zu definieren.

Zur Einbeziehung des parallelisierten thermohydraulischen Simulators TOUGH2-MP in den FTK-Simulator sind Modifikationen sowohl an den FTK-Funktionen in der in FLAC<sup>3D</sup> enthaltenen Programmiersprache FISH wie auch am Fortran-Quellcode von TOUGH2-MP erforderlich gewesen. Die Modifikationen umfassen dabei zum einen Modifikationen an TOUGH2-MP, die bereits für das serielle Pendant TOUGH2 im Rahmen der vorangegangenen Forschungsvorhaben 02E11041 (BMW / Entwicklung des FTK-Simulators) und 02S9082A (BMBF / ENTRIA) erfolgt sind. Zum anderen sind weitere Passagen in beiden Quellcodes modifiziert worden mit den Zielen einer Homogenisierung der Zeitreihenschnittstellen von FLAC<sup>3D</sup> mit TOUGH2 und von FLAC<sup>3D</sup> mit TOUGH2-MP zur Einfachhaltung der entsprechenden Einlesefunktionen in FLAC<sup>3D</sup>, einer Erweiterung der Funktionalität, einer erleichterten Bedienung sowie einer robusteren Funktionsweise. Im Folgenden wird auf die vorgenommenen Modifikationen näher eingegangen.

Die Modifikationen für die Kopplung mit TOUGH2, die auf die Kopplung mit TOUGH2-MP übertragen worden sind, sind die folgenden:

- Für FLAC<sup>3D</sup> besteht unter den herstellerseitigen Funktionalitäten von TOUGH2(-MP) lediglich Zugriff auf die thermohydraulischen Primärvariablen und die Porositäten jeder Modellzone, nicht aber deren Sekundärvariablen wie beispielsweise der Fluidichten unter den vorherrschenden Drücken und Temperaturen oder der Relativpermeabilitäten. Auch können Primärvariablen in TOUGH2(-MP) bei bestimmten Änderungen des thermohydraulischen Zustands wechseln, wie es beispielsweise bei der vollständigen Verdrängung der Gasphase in einer Modellzone oder umgekehrt der erstmaligen Ausbildung einer Gasphase in einer Modellzone der Fall ist, bei der zwischen den Primärvariablen Flüssigkeitssättigung und Luftmassenanteil an der Flüssigphase umgeschaltet wird. Des Weiteren ist in TOUGH2 eine Berechnung von zonal gemittelten Strömungsvektoren zur Visualisierung der hydraulischen Strömungsfelder für beide fluide Phasen implementiert worden. Die genannten Zustandsinformationen, die in FLAC<sup>3D</sup> fehlen, aber ggf. für den



weiteren Simulationsverlauf und für die Berechnungsauswertung relevant werden, müssten daher in FISH nach jedem Einlesen der Berechnungsergebnisse aus TOUGH2(-MP) neu berechnet werden, wobei sich aufgrunddessen insbesondere mit Blick auf die Neuberechnung der Sekundärvariablen die gesamten Simulationsdauern vor allem bei großen Berechnungsmodellen akkumulieren können. Aus diesem Grund sind in TOUGH2 bereits Modifikationen zur erweiterten Ausgabe der fehlenden Daten über die Ausgangsdatei `SAVE` vorgenommen worden.

In TOUGH2-MP wurde nun gemäß den Ausführungen in Abschnitt 4.2 auf die Rückübertragung der von jedem parallel abgelaufenen Prozess berechneten Daten (mit Ausnahme derjenigen Daten, die für die Datei `SAVE` in ihrer herstellerseitigen Fassung benötigt werden) an den Masterprozess und die dort erfolgende Sortierung dieser Daten verzichtet. Die fehlende geordnete Rückübertragungsfunktionalität ist somit von der TUC in TOUGH2-MP nachzuimplementieren gewesen, was eine Auseinandersetzung auch mit Funktionen aus der MPI-Schnittstelle und Strukturen aus der METIS-Bibliothek erforderlich gemacht hat.

- Die im Rahmen der Entwicklung des FTK-Simulators erfolgten Erweiterungen an den Relativpermeabilitäts- und Kapillardruckfunktionen sind in TOUGH2-MP implementiert worden.
- Umfangreiche Textausgaben von Berechnungsergebnissen zu benutzerseitig festzulegenden Zeitpunkten sowie am Ende der Berechnung in die Datei `AUSGABE` sind im Rahmen einer FTK-Simulation auch aufgrund der im vorangehenden Spiegelstrich erwähnten Datenübertragung von TOUGH2-MP an FLAC<sup>3D</sup> über die `SAVE`-Datei nicht erforderlich. Zur Reduzierung des aus den Textausgaben aber mitunter enormen resultierenden Festplattenspeicherbedarfs bei einer FTK-Simulation und zur Erhaltung der Übersichtlichkeit der Ausgangsdateien von TOUGH2-MP sind diese Textausgaben daher unterdrückt worden.

Die wichtigste neue Modifikation, die im Rahmen der mit diesem Bericht dokumentierten Arbeiten am FTK-Simulator vorgenommen worden ist, ist naheliegenderweise der Einbau des parallelisierten thermohydraulischen Simulators TOUGH2-MP in den FTK-Simulator. Dabei kann in dem für die FTK-Simulation eines Modellbeispiels zu erstellenden Benutzerprogramm über die Angabe der gewünschten Anzahl der Prozesse für die thermohydraulischen Teilsimulationen verfügt werden, ob der Simulator TOUGH2 oder der Simulator TOUGH2-MP zum



Einsatz kommt. Neben dem Einbau von TOUGH2-MP sind aber auch weitere neue Modifikationen an den Fortran-Quellcodes und an den FTK-Funktionen vorgenommen worden:

- In TOUGH2 und auch in TOUGH2-MP besteht die Möglichkeit zur Aufbringung von thermischen und hydraulischen Quellen und/oder Senken in das Berechnungsmodell. Die Aufbringung der Quellen und Senken erfolgt dabei jeweils über die Angabe von Zahlenwertepaaren für die zu unterschiedlichen Zeitpunkten angesetzten Quellstärken. Im Fall von hydraulischen Quellen kann vom Benutzer zudem indirekt die Temperatur des generierten oder eingespeisten Fluides festgelegt werden, indem für jeden Zeitpunkt die spezifische Enthalpie des Fluides mit angegeben wird. Die aufgrund der in der Regel unbekanntenen Zahlenwerte für die spezifischen Enthalpien eher weniger benutzerfreundliche Eingabemöglichkeit konnte bei der Entwicklung des FTK-Simulators durch die Einführung von zwischengeschalteten Zusatzzonen, die jeweils die ihnen zugeordnete hydraulische Quelle enthält, umgangen werden. Dabei wird die Temperatur einer jeden derartigen Zusatzzone mit dem entsprechenden Zahlenwert für die Fluidtemperatur vorgegeben und fixiert. Allerdings hat diese Methode längere Simulationsdauern und mitunter auch Programmabstürze aufgrund von in der Numerik begründeten Schwierigkeiten zur Folge gehabt. Die geschilderten Nachteile sind auch bereits in *Lux et al. (2015)* erkannt und genannt worden in Verbindung mit der Idee, eine automatische Umrechnung der gegebenen Temperaturen in Zahlenwerte für die spezifische Enthalpie mithilfe von Funktionsvorschriften aus TOUGH2(-MP) zu implementieren. Dieser Umrechnungsansatz ist nun in TOUGH2-MP implementiert worden.
- Die Ausgaben von Zeitreihen erfolgt in TOUGH2-MP anders als in TOUGH2 und erscheint zudem eher unübersichtlich. Darüber hinaus sind die auszugebenden Größen in unterschiedlichen EOS-Modulen nicht immer vollständig zusammengetragen und teilweise auch aufgrund von Übertragungsfehlern irreführend beschriftet. Mit dem eigentlichen Ziel gleich strukturierter Zeitreihenausgangsdateien in TOUGH2 und in TOUGH2-MP zum vereinfachten Einlesen der Zeitreihen in FLAC<sup>3D</sup> ohne Fallunterscheidungen sind die entsprechenden Funktionen sowohl für TOUGH2 wie auch für TOUGH2-MP daher auch mit Blick auf Vollständigkeit und Korrektheit überarbeitet worden. Dabei werden von beiden Simulatoren nun auch zeitliche Aufsummierungen von durch benutzerseitig festgelegte Verbindungen geströmten Fluidmengen durchgeführt und sowohl als



Massen in  $kg$  wie auch als Volumina in  $N\text{-}m^3$  (Normkubikmeter unter  $p = 1bar$  und  $T = 0^\circ C$ ) ausgegeben.

- Bei der Entwicklung des FTK-Simulators sind Strukturen zur räumlichen Aufsummierung von Strömungsmengen über benutzerseitig vorzugebende Verbindungen im Berechnungsmodell implementiert worden, welche zur Bilanzierung beispielsweise von durch Behälterkorrosion generierten Gasmengen, die im Verlauf der Simulation aus einem verfüllten Streckenbereich über die Streckenkontur in das umgebende Gebirge migrieren, verwendet werden können, *Lux et al. (2015)*. Dieses eher starr umgesetzte Fluidmengenbilanzierungskonzept ist im Rahmen der in diesem Vorprojekt erfolgten Weiterentwicklung des FTK-Simulators auf mehrere sogenannte „Bilanzierungssets“ – Gruppen von Verbindungen im Modellgitter, für die die durchströmenden Flüssigkeits- und/oder Gasmengen aufaddiert werden – und mit einer flexibleren Bedienbarkeit erweitert worden. Auf diese Weise können z.B. akkumulierte Strömungsmengen von Gasen, die sich über unterschiedliche mögliche Fließpfade im Endlagernah- und -fernfeld in Richtung der Biosphäre ausgebreitet haben, verglichen werden.
- Analog zu den zu mehreren Verbindungen definierbaren Bilanzierungssets können nach den erfolgten Modifikationen im TOUGH2-MP-Quellcode auch sogenannte „Mittelungssets“ zu mehreren Modellzonen definiert werden, für die TOUGH2-MP dann die aufgezeichneten Primärvariablen arithmetisch mittelt. Befinden sich Auswertungspunkte von modellierten laborativen Untersuchungen oder Feldexperimenten auf einer Zonengrenzfläche in einem asymmetrischen Modell, wie es in dem im Bild 4.1 gezeigten Beispiel der Modellierung des DM-B-Experiments im UTL Mont Terri aus *Lux et al. (2015)* mehrfach der Fall ist, können über die Mittelungen der Primärvariablen dennoch schnell sinnvolle zeitabhängige Zahlenwerte aus der numerischen Simulation der Untersuchungen zur Gegenüberstellung mit den messtechnisch erhaltenen Zahlenwerten gewonnen werden.
- Die Dimensionierung der zeitreihenbezogenen Feldvariablen ist in TOUGH2-MP herstellerseitig mit einem fest eingestellten Zahlenwert erfolgt. Mit Blick auf die teilweise äußerst umfangreichen Zeitreihenanalysen, die an der TUC mitunter zum Aufbau des Verständnisses für die in einem größeren Berechnungsmodell ablaufenden komplexen multiphysikalischen Prozesse durchgeführt werden, ist diese Beschränkung zugunsten einer dynamischen Felddimensionierung analog zu den in TOUGH2-MP bereits bestehenden

Implementierungen für zonen- und verbindungsbezogene Zeitreihen aufgehoben worden. Dabei ist zu eruieren gewesen, an welchen Stellen im Quellcode welche Interprozesskommunikationen und welche Speicherplatzallozierungen für den Masterprozess und für die Slaveprozesse vorzunehmen gewesen sind.

- Basierend auf den Erfahrungen zur Zeitschrittsteuerung bei der Entwicklung des FTK-Simulators ist eine optionale Zeitschrittsteuerungsfunktion in den FTK-Simulator implementiert worden, bei der die Länge des folgenden zu simulierenden TH-Zeitabschnitts durch den mechanischen Kräfteausbalancierungsgrad im simulierten Modell nach dem Einlesen der im vergangenen TH-Zeitabschnitt neu berechneten thermohydraulischen Zustandsvariablen gesteuert wird. Hierzu wird die Größe der mechanischen Disbalance  $d$  über das Verhältnis von Istwert zu Zielwert des „unbalanced-forces ratios“ aus dem Simulator FLAC<sup>3D</sup> (= FISH-Variable `mech_ratio` geteilt durch die Zahlenangabe für den Befehl `solve age`) eingeführt. Mit einem benutzerdefinierten Referenzwert  $d_{ref}$  für die Disbalance wird schließlich ein Anpassungsfaktor  $f$  für den folgenden zu simulierenden Zeitabschnitt aus der folgenden Gleichung (4.1) erhalten:

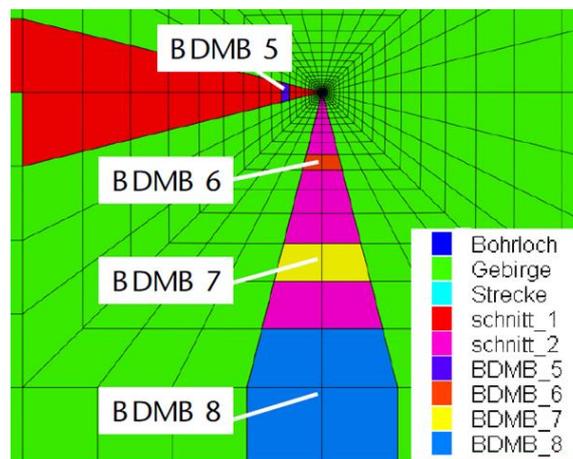
$$f = \left( \frac{d_{ref}}{d} \right)^{0,3} \quad (4.1)$$

Bei einer zu großen Disbalance  $d > d_{ref}$  wird die Zeitschrittlänge reduziert, bei  $d < d_{ref}$  erhöht. Der Exponent 0,3 wirkt dabei zu starken zeitlichen Schwankungen des TH-Zeitabschnitts entgegen.

- Geringfügigere Änderungen sind hinsichtlich der Bestimmung des äquivalenten Porendrucks („Porenmischdruck“) für den Simulator FLAC<sup>3D</sup> sowie für die Wahlmöglichkeit der Art der Zeitreihenaufzeichnung in FLAC<sup>3D</sup> vorgenommen worden.

Der Simulator FTK 3.00 ist während der Arbeiten zu seiner Weiterentwicklung konsequent auf die korrekte Funktionsweise hinsichtlich der erfolgten Modifikationen überprüft worden. Insbesondere sind erste Vergleiche von Berechnungsergebnissen, die aus der parallelen Version (mit TOUGH2-MP) und aus der seriellen Version (mit TOUGH2) des FTK-Simulators zu einem TH<sup>2</sup>M-Modellbeispiel in Anlehnung an *Zhao (2017)* erhalten worden sind, durchgeführt worden. Als Resultat hat sich eine gute zahlenmäßige Übereinstimmung der Ergebnisse ergeben. Eine Bewertung der Effizienz der parallelen Version des FTK-Simulators gegenüber der

seriellen Version anhand eines geeigneten HM-gekoppelten Modells ist aber noch vorzunehmen, da im vorliegenden Beispielmodell der Berechnungsaufwand weitestgehend in den mechanischen Teilsimulationen und in der Interkommunikation zwischen FLAC<sup>3D</sup> und TOUGH2-MP begründet ist. Hydraulische Vergleichsberechnungen mit TOUGH2 und TOUGH2-MP bestätigen allerdings, dass der Einsatz des Simulators TOUGH2-MP einen signifikanten Vorteil in der Berechnungsdauer verschaffen kann, wenn hinreichend hohe Berechnungskapazitäten auf dem verwendeten Rechner zur Verfügung stehen.



*Bild 4.1: Ausschnitt aus dem Bohrloch-Strecke-Modell zum DM-B-Experiment im schweizerischen UTL Mont Terri mit farblicher Hervorhebung u.a. der Positionen der im Experiment installierten Porendruckmesssensoren in den vier Observationsbohrlöchern BDM-B5 bis -B8 in der Umgebung des Bohrlochs BDM-B1 (im sehr fein diskretisierten Bereich), Lux et al. (2015)*



## **5 Zusammenfassung der Ergebnisse des BenVaSim-Vorprojekts und Ausblick auf das folgende Hauptprojekt**

Ziel des hier bearbeiteten und mit dem vorliegenden Bericht dokumentierten Vorprojekts ist es gewesen, vorbereitende Arbeiten zum anschließenden Benchmarking-Projekt „BenVaSim“, das die Verifizierung unterschiedlicher TH<sup>2</sup>M-Simulatoren zum Inhalt hat, durchzuführen. Die vorbereitenden Arbeiten umfassen dabei zum einen Rechercharbeiten zu bisher erfolgten Benchmarkings sowie zu den Fähigkeiten und Eigenschaften der Simulatoren, die in dem BenVaSim-Projekt zum Einsatz gebracht werden sollen. Zum anderen ist der FTK-Simulator, der auf der Seite des BenVaSim-Projektpartners und Koordinators TUC in diesem Benchmarking verifiziert werden soll, insbesondere im Hinblick auf die Steigerung seiner Effizienz bei größeren Berechnungsmodellen weiterentwickelt worden.

Die Rechercharbeiten zu bisher erfolgten Benchmarkings haben ergeben, dass Benchmarkings, welche die rechnerische Reproduktion von aus Labor- oder Felduntersuchungen erhaltenen Messwerten und Graphen zum Ziel haben, zwar im Grundsatz dazu geeignet sind, die unterschiedlichen modellierungstechnischen Herangehensweisen sowie die physikalischen und numerischen Ansätze, mit denen Forschungseinrichtungen und -unternehmen Aufgabenstellungen zur Beantwortung von Integritäts-, Stabilitäts- und Risikobewertungsfragen im Rahmen von Endlagerplanungen und Langzeitsicherheitsanalysen bearbeiten, mit Blick auf die Eignung dieser Ansätze und damit auf die Zuverlässigkeit dieser Herangehensweisen bewertbar zu machen. Bei der bei derartigen Benchmarkings praktizierten Vorgehensweise bleibt aber generell die Frage nach der numerischen Qualität der Simulatoren offen, da Auswirkungen aus dem modellierungstechnischen Bearbeitungsansatz und Auswirkungen aus seiner numerischen Umsetzung hierbei nicht klar voneinander abgegrenzt werden können. Neben diesen auf Labor- und Felduntersuchungen beruhenden Validierungen sind auch in geringerem Umfang organisationsübergreifende Simulatoren-Benchmarkings durchgeführt worden, bei denen die Rahmenbedingungen für die Berechnungsmodelle inklusive der involvierten Differenzialgleichungen vorgegeben worden sind und damit primär die numerischen Lösungsverfahren die zahlenmäßigen Resultate und die Differenzen zwischen ihnen bestimmt haben.

Insgesamt deuten die Resultate aus unterschiedlichen Benchmarking-Beispielen einerseits darauf hin, dass die Einflüsse aus der Numerik bei der Beschränkung auf kontinuumsmechanische Modellierungsansätze möglicherweise auch generell eher untergeordnet sind, aber andererseits auch darauf, dass zur Feststellung der numerischen Qualität ein Simulatoren-Benchmarking ein



probates Mittel ist. Vor dem beschriebenen Hintergrund wird somit für das BenVaSim-Hauptprojekt die Bearbeitung von möglichst identischen Modellbeispielen mit minimalem Interpretationsfreiraum für die Projektpartner als übergeordnete Rahmenbedingung für die vorzunehmenden Verifizierungssimulationen festgelegt. Eine systematisch strukturierte, schrittweise Vorgehensweise mit sukzessiv ansteigenden Komplexitätsgraden der Benchmark-Berechnungsmodelle, wie sie in den meisten der betrachteten Simulatoren-Benchmarkings erfolgt ist, erscheint dabei ebenfalls sinnvoll.

Die unterschiedlichen Simulatoren, die von den Partnerorganisationen im BenVaSim-Projekt eingesetzt werden sollen, basieren auf dem Ansatz der kontinuumsmechanischen Modellierung und lösen weitestgehend die identischen Grundgleichungen für die thermischen, hydraulischen und mechanischen Prozesse. Auch sind mechanische Stoffmodelle in ausreichendem Maß für die Zusammenstellung von hinreichend diversen Berechnungsvariationen vorhanden. Allerdings ist auch festzustellen, dass die Verwendung von unterschiedlichen numerischen Methoden (FEM, FDM und IFDM/FVM) in den Simulatoren einen Einfluss auch auf die Wahl einer optimalen Modelldiskretisierung hat. Dieser Sachverhalt ist für den Fall der angedachten Berechnungsvariationen mit identischen Diskretisierungen zur Reduzierung diskretisierungsbedingter Einflüsse und der dazu vorzunehmenden Erstellung bzw. Konversion der entsprechenden Diskretisierung für die unterschiedlichen Simulatoren zu bedenken. Die Gegenüberstellung der am BenVaSim-Projekt beteiligten Simulatoren zeigt des Weiteren Stellen auf, an denen für den von der TUC in das Benchmarking eingebrachten FTK-Simulator noch Weiterentwicklungsbedarf mit Blick auf die vorstehend genannten übergeordnete Rahmenbedingung für das Benchmarking besteht. Als vorrangige Aspekte können dabei die Unterstützung von anisotropen hydraulisch-thermischen Strömungsprozessen, von Diffusionsprozessen für Wasserdampf, von einem angemessen erweiterten Effektivspannungskonzept nach *Biot* für teilgesättigte Modellbereiche sowie von Porositätsänderungen durch den FTK-Simulator eingestuft werden.

Schließlich konnte eine Weiterentwicklung des bis dato bestehenden FTK-Simulators in der Version 2 auf die Versionsstufe 3 durch die Einbeziehung des parallelisierten thermohydraulischen Simulators TOUGH2-MP erfolgreich vorgenommen werden. Im Rahmen der zur Simulatorweiterentwicklung durchgeführten Arbeiten ist eine Einarbeitung in den im Vergleich zu TOUGH2 sehr stark veränderten Fortran-Quellcode von TOUGH2-MP erfolgt. Die bislang an der TUC erfolgten Adaptionen am Simulator TOUGH2 konnten im Ergebnis auf den parallelisierten Simulator TOUGH2-MP übertragen werden. Ebenfalls sind die FTK-Funktionen zur



Simulatorenkopplung an die veränderten Ein- und Ausgabedateien von TOUGH2-MP angepasst worden. Testläufe mit beiden FTK-Versionen haben dabei belegt, dass die Funktionalität des FTK-Simulators durch die Verwendung von TOUGH2-MP und durch die Modifikationen der Quellcodes erhalten bleibt.



## 6 Danksagung

Die Bearbeitung des Forschungsvorhabens ist möglich geworden durch die freundliche Hilfe und Unterstützung von Fachkollegen insbesondere zum Einsatz des Simulators TOUGH2-MP am Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik sowie mit Blick speziell auf das BenVaSim-Projekt zur Vorstellung der Simulatoren und zur Möglichkeit für Ideenaustausche und erste Diskussionen zu den Inhalten des Projekts. Zu danken ist insbesondere Herrn Prof. Dr. Jonny Rutqvist vom US-amerikanischen Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL) für die Zurverfügungstellung des Quellcodes zum Programm TOUGH2-MP im Rahmen der Fortführung der bestehenden Forschungsk Kooperation durch das BenVaSim-Projekt sowie den Herren Prof. Dr. Michael Z. Hou und Yang Gou, M.Sc. vom Energie-Forschungszentrum Niedersachsen (EFZN) für die umfassenden Hilfestellungen bei der Kompilierung des TOUGH2-MP-Quellcodes inklusive der von ihm verwendeten Bibliotheken METIS, Aztec und BLAS.

Des Weiteren gilt ein Dank auch an die Herren Dr. Christophe Nussbaum und Heinz Hauser vom schweizerischen Bundesamt für Landestopografie (swisstopo) dafür, im zeitlichen und örtlichen Umfeld des Mont Terri Technical Meetings ein erstes Vortreffen zum BenVaSim-Projekt ermöglicht und vor Ort organisatorisch unterstützt zu haben, sowie allen Mitarbeitern der BenVaSim-Partnerorganisationen BGR, ENSI, GRS und LBNL für das Interesse und die Teilnahme am Benchmarking und für die fruchtbaren Diskussionen und Anregungen, die sich im Rahmen des Vortreffens und der diversen bilateralen Fachtreffen zur Vorstellung der einzusetzenden Simulatoren gemeinschaftlich entwickelt haben.

Ein ebensolcher Dank gilt dem Projektträger Karlsruhe – Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE) mit den Herren Dipl.-Ing. M. Bühler und Dr. W. Steininger für die grundlegende organisatorische Realisierung des Projektes und die jederzeitige hilfreiche Unterstützung bei der gelegentlich erforderlichen Überwindung von insbesondere organisatorischen und administrativen Hürden sowie das stetige Interesse an der Realisierung des Benchmarking-Projekts BenVaSim. Ausdrücklicher Dank gebührt dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) für die finanzielle Förderung dieses und des folgenden Forschungsvorhabens (Vor- und Hauptprojekt).



## 7 Literaturverzeichnis

In den untenstehenden Literaturquellen werden u.a. folgende Abkürzungen verwendet:

- AIME American Institute of Mining, Metallurgical, and Petroleum Engineers,  
vormals American Institute of Mining and Metallurgical Engineers
- ARMA American Rock Mechanics Association
- BfS Bundesamt für Strahlenschutz
- BGR Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe
- BMBF Bundesministerium für Bildung und Forschung
- BMUB Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit,  
vormals Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU)
- BMWi Bundesministerium für Wirtschaft und Energie,  
vormals Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie,  
zwischenzeitlich Bundesministerium für Wirtschaft und Arbeit (BMWA)
- DBETEC DBE Technology GmbH
- ENSI Eidgenössisches Nuklearsicherheitsinspektorat
- ETHZ Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
- GRS Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH
- IFF Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung
- IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH
- KTH Königliche Technische Hochschule (Kungliga Tekniska Höskolan)
- LBNL Lawrence Berkeley National Laboratory,  
vormals Lawrence Berkeley Laboratory (LBL)
- LUH Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover,  
vormals Universität Hannover (UH)
- PTKA Projektträger Karlsruhe
- SKI Staatliches Kernkraftinspektorat Schweden (Statens Kärnkraftinspektion)
- TUC Technische Universität Clausthal
- UPC Polytechnische Universität Katalonien (Universitat Politècnica de Catalunya)



- Alonso, E.E.; Gens, A.; Josa, A. (1990): A constitutive model for partially saturated soils. Géotechnique, Band 40(3), Seiten 405-430, ICE Publishing, London, UK.*
- Alonso, E.E.; Alcoverro, J. (eds.) (2005): DECOVALEX III Project – Modelling of FEBEX In-Situ Test. SKI Report 2005:20. Abschlussbericht zum Task 1, SKI, Stockholm, Schweden.*
- Alonso, E.E.; Alcoverro, J.; Coste, F.; Malinsky, L.; Merrien-Soukatchoff, V.; Kadiri, I.; Nowak, T.; Shao, H.; Nguyen, T.S.; Selvadurai, A.P.S.; Armand, G.; Sobolik, S.R.; Itamura, M.; Stone, C.M.; Webb, S.W.; Rejeb, A.; Tijani, M.; Maouche, Z.; Kobayashi, A.; Kurikami, H.; Ito, A.; Sugita, Y.; Chijimatsu, M.; Börgesson, L.; Hernelind, J.; Rutqvist, J.; Tsang, C.-F.; Jussila, P. (2005): The FEBEX benchmark test: case definition and comparison of modelling approaches. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, Band 42(5-6), Seiten 611-638, Elsevier.*
- Bechthold, W.; Rothfuchs, T.; Poley, A.; Ghoreychi, M.; Heusermann, S.; Gens, A.; Olivella, S. (1999): Backfilling and Sealing of Underground Repositories for Radioactive Waste in Salt (BAMBUS project). Abschlussbericht EUR 19124 EN zum Projekt „BAMBUS“, EU-Veröffentlichung, Luxemburg, Luxemburg.*
- Bechthold, W.; Smailos, E.; Heusermann, S.; Bollingerfehr, W.; Bazargan-Sabet, B.; Rothfuchs, T.; Kamlot, P.; Grupa, J.; Olivella, S.; Hansen, F.D. (2004): Backfilling and sealing of underground repositories for radioactive waste in salt (Bambus II project). Abschlussbericht EUR 20621 EN zum Projekt „BAMBUS II“, EU-Veröffentlichung, Luxemburg, Luxemburg.*
- Becker, D.-A.; Buhmann, D.; Mönig, J.; Noseck, U.; Rübel, A.; Spießl, S. (2009): Endlager Morsleben – Sicherheitsanalyse für das verfüllte und verschlossene Endlager mit dem Programmpaket EMOS. Verfahrensunterlage P 278 zum Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben im Auftrag des BfS, GRS, Braunschweig.*
- Biot, M.A. (1941): General Theory of Three-Dimensional Consolidation. Journal of Applied Physics, Band 12(2), Seiten 155-164, American Institute of Physics Publishing, New York (Stadt & Bundesstaat), USA.*
- Birkholzer, J.T.; Rutqvist, J.; Sonnenthal, E.; Barr, D.; Fujisaki, K.; Fujita, T.; Chijimatsu, M.; Oda, Y.; Wang, W.; McDermott, C.; Kolditz, O.; Xie, M.; Du, Y.; Nowak, T.; Walsh, R.; Blum, P.; Shao, H.; Liu, Q.; Zhang, C.; Liu, X. (2008): DECOVALEX-THMC Project –*



Task D – Long-Term Permeability/Porosity Changes in the EDZ and Near Field due to THM and THC Processes in Volcanic and Crystalline-Bentonite Systems. *SKI Report 2008:45*. Abschlussbericht, SKI, Stockholm, Schweden.

*Blanco Martín, L.; Wolters, R.; Rutqvist, J.; Lux, K.-H.; Birkholzer, J.T. (2015):* Comparison of two simulators to investigate thermal-hydraulic-mechanical processes related to nuclear waste isolation in saliferous formations. *Computers and Geotechnics*, Band 66, Seiten 219-229, Elsevier.

*Blanco Martín, L.; Wolters, R.; Rutqvist, J.; Lux, K.-H.; Birkholzer, J.T. (2016):* Thermal-hydraulic-mechanical modeling of a large-scale heater test to investigate rock salt and crushed salt behavior under repository conditions for heat-generating nuclear waste. *Computers and Geotechnics*, Band 77, Seiten 120-133, Elsevier.

*Blanco Martín, L.; Rutqvist, J.; Birkholzer, J.T. (2017):* Extension of TOUGH-FLAC to the finite strain framework. *Computers & Geosciences*, Band 108 (Tagungsband des 5. TOUGH-Symposiums, 28.-30. September 2015, Berkeley, Kalifornien, USA), Seiten 64-71, Elsevier.

*Bossart, P.; Thury, M. (2008):* Mont Terri Rock Laboratory – Project, Programme 1996 to 2007 and Results. *Berichte der Landesgeologie (Swiss Geological Survey)*, Nr. 3, Wabern, Schweiz.

*Brooks, R.H.; Corey, A.T. (1964):* Hydraulic properties of porous media. *Hydrology Papers*, Nr. 3, Colorado State University, Fort Collins, Colorado, USA.

*Burdine, N.T. (1953):* Relative permeability calculations from pore size distribution data. *Petroleum Transactions*, Band 198, Seiten 71-78, AIME, Dallas, Texas, USA.

*Burgers, J.M. (1935):* Mechanical considerations—model systems—phenomenological theories of relaxation and of viscosity. First Report on Viscosity and Plasticity, *Verhandelingen der Koninklijke Akademie van Wetenschappen, Afdeling Natuurkunde, 1e Sectie*, Band 15(3), Seiten 5-72, N.V. Noord-Hollandsche Uitgevers Maatschappij, Amsterdam, Niederlande.

*BMWi; PTKA-WTE (2015):* Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle – Förderkonzept des BMWi 2015-2018. PTKA, Karlsruhe.



- Carrayrou, J.; Kern, M.; Knabner, P. (2010a):* Reactive transport benchmark of MoMaS. Computational Geosciences, Band 14(3) (Tagungsband zum internationalen MoMaS-Workshop „Reactive Transport Modelling“, 20. Januar 2008, Straßburg, Frankreich), Seiten 385-392, Springer-Verlag.
- Carrayrou, J.; Hoffmann, J.; Knabner, P.; Krütle, S.; de Dieuleveult, C.; Erhel, J.; van der Lee, J.; Lagneau, V.; Mayer, K.U.; MacQuarrie, K.T.B. (2010b):* Comparison of numerical methods for simulating strongly nonlinear and heterogeneous reactive transport problems—the MoMaS benchmark case. Computational Geosciences, Band 14(3) (Tagungsband zum internationalen MoMaS-Workshop „Reactive Transport Modelling“, 20. Januar 2008, Straßburg, Frankreich), Seiten 483-502, Springer-Verlag.
- Chavant, C. (2007):* Simulation d’excavation en comportement hydro mécanique fragile – Résultats du benchmark mené dans le cadre du GDR MOMAS. Ergebnisbericht zum in den Jahren 2003-2005 durchgeführten Benchmarking zu hydromechanischen Prozessen im Rahmen einer Tunnelauffahrung, Électricité de France (EDF) SA, Clamart, Frankreich.
- COMSOL Inc. (2012):* COMSOL Multiphysics 4.3, User’s Guide. Offizielles Software-Benutzerhandbuch.
- Corey, A.T. (1954):* The Interrelation Between Gas and Oil Relative Permeabilities. Producers Monthly, Band 19(1), Seiten 38-41, Bradford District Pennsylvania Oil Producers Association, Bradford, Pennsylvania, USA.
- Datta, R.N. (ed.) (2005):* DECOVALEX III Project – Thermal-Mechanical Modeling of the Yucca Mountain Project Drift Scale Test. *SKI Report 2005:22*. Abschlussbericht zu den Tasks 2B und 2C, SKI, Stockholm, Schweden.
- de Coulomb, C.-A. (1776):* Essai sur une application des règles de maximis et minimis à quelques problèmes de statique, relatifs à l’architecture. Mémoires de Mathématique et de Physique, Présentés à l’Académie Royale des Sciences, par divers Savans, & lûs dans ses Assemblées, Band 7, Seiten 343-382, Imprimerie Royale, Paris, Frankreich.
- Drucker, D.C.; Prager, W. (1952):* Soil mechanics and plastic analysis or limit design. Quarterly of Applied Mathematics, Band 10(2), Seiten 157-165, William Byrd Press, Richmond, Virginia, USA.
- Garitte, B.; Bond, A.; Millard, A.; Zhang, C.; McDermott, C.; Nakama, S.; Gens, A. (2013):* Analysis of hydro-mechanical processes in a ventilated tunnel in an argillaceous rock on the



basis of different modelling approaches. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, Band 5(1), Seiten 1-17, Elsevier.

*Garitte, B.; Gens, A.; Vaunat, J.; Armand, G. (2014): Thermal Conductivity of Argillaceous Rocks: Determination Methodology Using In Situ Heating Tests. Rock Mechanics and Rock Engineering*, Band 47(1), Seiten 111-129, Springer-Verlag.

*Garitte, B.; Shao, H.; Wang, W.; Wang, X.; Pan, P.; Feng, X.; Nguyen, T.S.; Li, Z.; Manepally, C.; Dasgupta, B.; Stothoff, S.; Ofoegbu, G.; Graupner, B.J.; Ballarini, E.; Maekawa, K.; Lee, C.-s.; Rutqvist, J.; Chen, F.; Birkholzer, J.T.; Fedors, R. (2016): DECOVALEX-2015 project – Task B1 final report. TRITA-LWR.Report 2015:04. Abschlussbericht, KTH, Stockholm, Schweden.*

*Graupner, B.J.; Lee, C.; Maekawa, K.; Manepally, C.; Pan, P.; Rutqvist, J.; Wang, W.; Garitte, B. (2015): DECOVALEX: Benchmark of the coupled THM simulation of the HE-D experiment. Präsentation auf dem 33. Technical Meeting des Mont Terri Project, 11.-12. Februar 2015, Pruntrut (Porrentruy), Schweiz.*

*Hampel, A. (2012): Comparisons of IFC and HFCEP simulation results of the project partners. Präsentation auf dem öffentlichen 7. Workshop des Verbundprojektes BMWi-I, „Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz“, im Rahmen des 3. „US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operations“, 9.-11. Oktober 2012, Albuquerque, Neumexiko, USA.*

*Hampel, A.; Herchen, K.; Lux, K.-H.; Günther, R.-M.; Salzer, K.; Minkley, W.; Pudewills, A.; Yildirim, S.; Rokahr, R.; Missal, C.; Gährken, A.; Stahlmann, J. (2016): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz. Synthesebericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit den Förderkennzeichen 02E10810 bis 02E10860.*

*Hansmann, J. (2012): Analysis of transient surface deformations above the Gotthard Base Tunnel (Switzerland). Dissertation Nr. 20177, ETHZ, Zürich, Schweiz.*

*Hansmann, J.; Lorenzo Sentís, M.; Belardinelli, C.; Graupner, B.J.; Hugi, M.; Leuz, A.-K. (2012): Numerical Simulations of Radionuclide Transport through Clay and Confining Units in a Geological Repository using COMSOL. Online-Tagungsband zur COMSOL-Konferenz, 10.-12. Oktober 2012, Mailand, Italien, Paper 13808.*



- Hoek, E.; Brown, E.T. (1980):* Underground Excavations in Rock. Institution of Mining and Metallurgy, E & FN Spon, London, UK.
- Hoek, E.; Brown, E.T. (1997):* Practical Estimates of Rock Mass Strength. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, Band 34(8), Seiten 1165-1186, Elsevier.
- Hotzel, S. (2014):* Gasausbreitung in unverritztes Steinsalz – Hydro-mechanisch gekoppelte Modellrechnungen mit dem Simulationstool TFC. GRS-339. Bericht zum BMUB-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 3610R03230, GRS, Köln.
- Hou, Z. (2002):* Geomechanische Planungskonzepte für untertägige Tragwerke mit besonderer Berücksichtigung von Gefügeschädigung, Verheilung und hydromechanischer Kopplung. Heft Nr. 13 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, TUC, Clausthal-Zellerfeld. Habilitationsschrift.
- Hudson, J.A.; Jing, L.; Hoch, A.; Hokr, M.; Leung, C.; Zimmerman, R.W.; Liu, Q.; Wu, Y.; Rutqvist, J.; Neretnieks, I.; Zhao, Z. (2012):* DECOVALEX-2011 Project – Final Report of Task C – Assessment of coupled THMC processes in single fractures and fractured rocks. TRITA-LWR.Report 3036. Abschlussbericht, KTH, Stockholm, Schweden.
- Hudson, J.A.; Jing, L. (eds.) (2012):* DECOVALEX-2011 project – Executive summary. TRITA-LWR.Report 3037. Abschlussbericht, KTH, Stockholm, Schweden.
- Hudson, J.A.; Jing, L. (2013):* Demonstration of coupled models and their validation against experiment: The current phase DECOVALEX 2015. Rock Characterisation, Modelling and Engineering Design Methods (Tagungsbuch zum 3. ISRM-SINOROCK-Symposium, 18.-20. Juni 2013, Shanghai, China), Seiten 391-396, CRC Press.
- Hunsche, U.; Hampel, A. (1999):* Rock salt—the mechanical properties of the host rock material for a radioactive waste repository. Engineering Geology, Band 52(3-4), Seiten 271-291, Elsevier.
- IFC (1967):* The 1967 IFC Formulation for Industrial Use: A Formulation of the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance. Internationaler Formulierungsausschuss (International Formulation Committee) der 6. „International Conference on the Properties of Steam“ vom 7.-10. Oktober 1963 in New York (Stadt & Bundesstaat), USA. IFC Secretariat, Verein Deutscher Ingenieure, Düsseldorf.



- Itasca Consulting Group Inc. (2009/2012):* FLAC<sup>3D</sup>, User's Guide. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, Minneapolis, Minnesota, USA. (Versionsauszug: 2009 überarbeitet für Version 4.0, 2012 überarbeitet für Version 5.0)
- Jeanne, P.; Rutqvist, J. (2015):* Stress field response to massive injection of cold water into a geothermal reservoir: TOUGH-FLAC simulation. Online-Tagungsband des 5. TOUGH-Symposiums, 28.-30. September 2015, Berkeley, Kalifornien, USA, Seiten 126-133.
- Jing, L.; Rutqvist, J.; Stephansson, O.; Tsang, C.-F.; Kautsky, F. (1993):* DECOVALEX – Mathematical Models of Coupled T-H-M Processes for Nuclear Waste Repositories – Report of Phase I. *SKI TR 93:31*. Bericht zum ersten Jahr der Projektphase DECOVALEX-I, SKI, Stockholm, Schweden.
- Jing, L.; Rutqvist, J.; Stephansson, O.; Tsang, C.-F.; Kautsky, F. (1994):* DECOVALEX – Mathematical Models of Coupled T-H-M Processes for Nuclear Waste Repositories – Report of Phase II. *SKI Report 94:16*. Bericht zum zweiten Jahr der Projektphase DECOVALEX-I, SKI, Stockholm, Schweden.
- Jing, L.; Rutqvist, J.; Stephansson, O.; Tsang, C.-F.; Kautsky, F. (eds.) (1995):* DECOVALEX – Mathematical Models of Coupled T-H-M Processes for Nuclear Waste Repositories – Report of Phase III. *SKI Report 95:80*. Bericht zum dritten Jahr der Projektphase DECOVALEX-I, SKI, Stockholm, Schweden.
- Jing, L.; Stephansson, O.; Tsang, C.-F.; Kautsky, F. (eds.) (1996):* DECOVALEX – Mathematical Models of Coupled T-H-M Processes for Nuclear Waste Repositories – Executive Summary for Phases I, II and III. *SKI Report 96:58*. Abschlussbericht für die dreijährige Projektphase DECOVALEX-I, SKI, Stockholm, Schweden.
- Jing, L.; Stephansson, O.; Tsang, C.-F.; Knight, L.J.; Kautsky, F. (eds.) (1999):* DECOVALEX II Project – Executive Summary. *SKI Report 99:24*. Abschlussbericht, SKI, Stockholm, Schweden.
- Jing, L.; Tsang, C.-F.; Mayor, J.C.; Stephansson, O.; Kautsky, F. (eds.) (2005):* DECOVALEX III Project – Mathematical Models of Coupled Thermal-Hydro-Mechanical Processes for Nuclear Waste Repositories – Executive Summary. *SKI Report 2005:19*. Abschlussbericht, SKI, Stockholm, Schweden.



- Jing, L.; Kautsky, F.; Stephansson, O.; Tsang, C.-F. (eds.) (2008):* DECOVALEX-THMC Project – Executive Summary. *SKI Report 2008:40*. Abschlussbericht, SKI, Stockholm, Schweden.
- Jing, L.; Hudson, J.A.; Birkholzer, J.T. (eds.) (2016):* DECOVALEX-2015 project – Executive summary. *TRITA-LWR.Report 2015:02*. Abschlussbericht, KTH, Stockholm, Schweden.
- Jockwer, N.; Wieczorek, K. (2008):* ADDIGAS – Advective and Diffuse Gas Transport in Rock Salt Formations. *GRS-224*. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E9824, GRS, Braunschweig.
- Karypis, G. (2013):* METIS – A Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes, and Computing Fill-Reducing Orderings of Sparse Matrices, Version 5.1.0. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota, USA.
- Kim, H.-m.; Rutqvist, J.; Ryu, D.-w.; Choi, B.-h.; Sunwoo, C.; Song, W.-k. (2012):* Exploring the concept of compressed air energy storage (CAES) in lined rock caverns at shallow depth: A modeling study of air tightness and energy balance. *Applied Energy*, Band 92, Seiten 653-667, Elsevier.
- Kock, I.; Eickemeier, R.; Frieling, G.; Heusermann, S.; Knauth, M.; Minkley, W.; Navarro, M.; Nipp, H.-K.; Vogel, P. (2012):* Integritätsanalyse der geologischen Barriere. *GRS-286*. Abschlussbericht zum Arbeitspaket 9.1 des BMU-Forschungsvorhabens „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“ (VSG), BGR/GRS/IfG, Köln.
- Kohlmeier, M.; Maßmann, J.; Wulkau, M.; Ziefle, G. (2009):* RockFlow 5, User’s Manual. Schlüsselwörterklärung zum offiziellen Software-Benutzerhandbuch, LUH, Hannover. (Version 5.1.10)
- Kolditz, O.; Habbar, A.; Kaiser, R.; Rother, T.; Thorenz, C.; Kohlmeier, M.; Moenickes, S. (2001):* ROCKFLOW – Data Concept, Graphical User Interface. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, UH, Hannover. (Version 3.5)
- 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, Hua; Shao, Haibing; Sun, F.; Sun, Y.; Singh, A.K.; Taron, J.; Walther, M.; Wang, W.; Watanabe, N.; Wu, Y.; Xie, M.; Xu, W.; Zehner, B. (2012a):* OpenGeoSys: an open-source initiative for



- numerical simulation of thermo-hydro-mechanical/chemical (THM/C) processes in porous media. *Environmental Earth Sciences*, Band 67(2), Seiten 589-599, Springer-Verlag.
- Kolditz, O.; Görke, U.-J.; Shao, Hua; Wang, W. (eds.) (2012b): Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Fractured Porous Media. Lecture Notes in Computational Science and Engineering (86), Springer-Verlag.*
- Kolditz, O.; Görke, U.-J.; Shao, Hua; Wang, W.; Bauer, S. (eds.) (2016): Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Fractured Porous Media: Modelling and Benchmarking – Benchmarking Initiatives. Terrestrial Environmental Sciences, Springer International Publishing.*
- Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe (2016): Verantwortung für die Zukunft – Ein faires und transparentes Verfahren für die Auswahl eines nationalen Endlagerstandortes. Abschlussbericht gemäß §4 StandAG (2013), Berlin.*
- Lerche, S. (2012): Kriech- und Schädigungsprozesse im Salinargebirge bei mono- und multi-zyklischer Belastung. Heft Nr. 18 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, TUC, Clausthal-Zellerfeld. Dissertation.*
- Leverett, M.C. (1940): Capillary Behavior in Porous Solids. Petroleum Technology, Technical Publication 1223, Seiten 152-169, AIME, New York (Stadt & Bundesstaat), USA.*
- Löw, S.; Lützenkirchen, V.; Hansmann, J.; Ryf, A.; Guntli, P. (2015): Transient surface deformations caused by the Gotthard Base Tunnel. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, Band 75, Seiten 82-101, Elsevier.*
- Lorenzo Sentís, M.; Altorfer, F.; Herfort, M.; Jakob, A.; Kosakowski, G.; Friedel, S. (2009): Benchmark Calculations with COMSOL of the Transport of Radionuclides through Clay and Bentonite Barriers in a Geological Repository. Online-Tagungsband zur COMSOL-Konferenz, 14.-16. Oktober 2009, Mailand, Italien, Paper 6708.*
- Lorenzo Sentís, M.; Leuz, A.-K. (2012): Sachplan geologische Tiefenlager, Etappe 1: Gasproduktion, Gastransport und deren Folgen für das SMA-Lager. *ENSI 33/56*. Technische Beurteilung, ENSI, Brugg, Schweiz.*
- Lux, K.-H.; Czaikowski, O.; Wolters, R.; Düsterloh, U. (2005): Gebirgsmechanische Beurteilung von Tongesteinsformationen im Hinblick auf die Endlagerung radioaktiver Abfälle. *PSP-Element WS-0029*. Abschlussbericht im Auftrag des BfS, TUC, Clausthal-Zellerfeld.*



*Lux, K.-H.; Czaikowski, O.; Wolters, R.; Düsterloh, U. (2006):* Laborative und numerische Grundlagenuntersuchungen zur Übertragbarkeit von Stoffmodellansätzen und EDV-Software für Endlager im Salzgestein auf Endlager im Tongestein. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E9632, TUC, Clausthal-Zellerfeld.

*Lux, K.-H.; Wolters, R.; Düsterloh, U. (2009):* Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckgetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrieren-Gebirge (Salinar). Abschlussbericht zum BMBF-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02C1355, TUC, Clausthal-Zellerfeld.

*Lux, K.-H.; Seeska, R. (2010):* Möglichkeiten der Datenerhebung von Übertage zur Standortbewertung von Endlagern im Tonsteingebirge. Abschlussbericht zum UFOPLAN-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 3607R02596 im Auftrag des BfS, TUC, Clausthal-Zellerfeld.

*Lux, K.-H.; Czaikowski, O.; Rutenberg, M.; Seeska, R.; Düsterloh, U. (2012):* Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E10427, TUC, Clausthal-Zellerfeld.

*Lux, K.-H.; Rutenberg, M.; Seeska, R.; Feierabend, J.; Düsterloh, U. (2015):* Kopplung der Softwarecodes FLAC<sup>3D</sup> und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten von Tongestein unter Endlagerbedingungen. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E11041, TUC, Clausthal-Zellerfeld.

*Lux, K.-H.; Wolters, R.; Zhao, J.; Rutenberg, M.; Feierabend, J.; Pan, T. (2017):* TH2M-basierte multiphysikalische Modellierung und Simulation von Referenz-Endlagersystemen im Salinar- und Tonsteingebirge. Arbeitsbericht 07 zum BMBF-Forschungsvorhaben „Entsorgungsoptionen für radioaktive Reststoffe: Interdisziplinäre Analysen und Entwicklung von Bewertungsgrundlagen“ (ENTRIA), Förderkennzeichen 02S9082A, TUC, Clausthal-Zellerfeld.

*Lux, K.-H.; Düsterloh, U.; Wolters, R.; Zhao, J.; Rutenberg, M.; Feierabend, J.; Pan, T. (2018):* Multiphysikalische Modellierung und Simulation von Referenz-Endlagersystemen im Sali-



nar- und Tonsteingebirge ohne bzw. mit Möglichkeit eines direkten Monitorings. Lehrstuhlbericht zu den ENTRIA-Teilprojekten VP 5.1, VP 5.2 und VP 6.7mod. Heft Nr. 23 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, TUC, Clausthal-Zellerfeld.

*Maßmann, J.; Jobmann, M.; Li, S.; Nowak, T.; Polster, M. (2013):* Projekt ANSICHT – Code-Benchmark zur Vorbereitung numerischer Berechnungen zum Nachweis der Integrität der geologischen Barriere. *TEC-09-2013-AP*. Bericht zum BMWi-Forschungsvorhaben „Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)“, GRS/BGR/DBETEC, Peine.

*Maxwell, J.C. (1868):* On the Dynamical Theory of Gases. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, Fourth Series, Band 35(2), Seiten 129-145, Taylor and Francis, London, UK.

*Message Passing Interface Forum (2012):* MPI: A Message-Passing Interface Standard, Version 3.0. Abschlussbericht, University of Tennessee, Knoxville, Tennessee, USA.

*Miehe, R.; Czaikowski, O.; Wieczorek, K. (2010):* BET – Barrier Integrity of the Isolating Rock Zone in Clay Formations. *GRS-261*. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E10116, GRS, Braunschweig.

*Mualem, Y. (1976):* A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media. *Water Resources Research*, Band 12(3), Seiten 513-522, Wiley-Blackwell.

*Müller-Hoeppe, N.; Breustedt, M.; Wolf, J.; Czaikowski, O.; Wieczorek, K. (2012):* Integrität geotechnischer Barrieren – Teil 2: Vertiefte Nachweisführung. *GRS-288*. Abschlussbericht zum Arbeitspaket 9.2 des BMU-Forschungsvorhabens „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“, DBETEC/GRS, Braunschweig.

*Nguyen, T.S.; Jing, L.; Kohlmeier, M.; Kaiser, R.; de Jonge, J.; Kolditz, O.; Millard, A.; Rejeb, A.; Chijimatsu, M.; Kurikami, H.; Ito, A.; Sujita, Y.; Rutqvist, J. (2005):* DECOVALEX III/BENCHPAR Projects – Implications of Thermo-Hydro-Mechanical Coupling on the Near-Field Safety of a Nuclear Waste Repository in a Homogeneous Rock Mass. *SKI Report 2005:25*. Abschlussbericht zum Benchmarktest BMT1B des DECOVALEX-III-Tasks 3 bzw. zum Arbeitspaket 2 des EC-Projekts BENCHPAR, SKI, Stockholm, Schweden.



- Niemeyer, M.; Resele, G.; Wilhelm, S.; Holocher, J.; Poppei, J.; Schwarz, R. (2009):* Endlager Morsleben – Sicherheitsanalyse für das verfüllte und verschlossene Endlager mit dem Programm PROSA. Verfahrensunterlage P 277 zum Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben im Auftrag des BfS, ÄF AB (Colenco), Baden, Schweiz.
- Norton, F.H. (1929):* The creep of steel at high temperatures. 1. Edition, McGraw-Hill Book Company, New York (Stadt & Bundesstaat), USA.
- Olivella, S.; Carrera, J.; Gens, A.; Alonso, E.E. (1994):* Nonisothermal Multiphase Flow of Brine and Gas Through Saline Media. Transport in Porous Media, Band 15(3), Seiten 271-293, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Niederlande.
- Popp, T.; Weise, D.; Salzer, K.; Wiedemann, M.; Günther, R.-M.; Minkley, W.; Philipp, J.; Dörner, D.; Hotzel, S. (2012):* Auswirkungen der Gasbildung im Endlager auf den einschlusswirksamen Gebirgsbereich. Abschlussbericht zum UFOPLAN-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 3609R03222 im Auftrag des BfS, IfG, Leipzig.
- Pruess, K. (1987):* TOUGH User's Guide. LBL-20700. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, LBL, Berkeley, Kalifornien, USA.
- Pruess, K.; Oldenburg, C.; Moridis, G. (1999/2012):* TOUGH2 User's Guide, Version 2. LBNL-43134. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, LBNL, Berkeley, Kalifornien, USA. (Versionen: 1999 Original, 2012 überarbeitet)
- Rejeb, A.; Rouabhi, A.; Millard, A.; Maßmann, J.; Uehara, S. (2008):* DECOVALEX-THMC Project – Task C – Hydro-mechanical response of the Tournemire argillite to the underground openings excavation: unsaturated zones and mine-by-test experiment. *SKI Report 2008:44*. Abschlussbericht, SKI, Stockholm, Schweden.
- Rinaldi, A.P.; Rutqvist, J. (2017):* Modeling ground surface uplift during CO<sub>2</sub> sequestration: the case of In Salah, Algeria. Energy Procedia, Band 114 (Tagungsband der 13. Konferenz „Greenhouse Gas Control Technologies“, 14.-18. November 2016, Lausanne, Schweiz), Seiten 3247-3256, Elsevier.
- Roscoe, K.H.; Burland, J.B. (1968):* On the generalized stress-strain behaviour of 'wet' clay. Engineering Plasticity (Tagungsband), Seiten 535-609, University Press, Cambridge, UK.



- Rothfuchs, T.; Czaikowski, O.; Hartwig, L.; Hellwald, K. ; Komischke, M.; Miehe, R.; Zhang, C.-L. (2012): Self-Sealing Barriers of Sand/Bentonite-Mixtures in a Clay Repository – SB-Experiment in the Mont Terri Rock Laboratory. GRS-302. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E9894, GRS, Braunschweig.*
- Rutqvist, J. (2011): Status of the TOUGH-FLAC simulator and recent applications related to coupled fluid flow and crustal deformations. Computers & Geosciences, Band 37(6) (Tagungsband des 3. TOUGH-Symposiums, 14.-16. September 2009, Berkeley, Kalifornien, USA), Seiten 739-750, Elsevier.*
- Rutqvist, J. (2017): An overview of TOUGH-based geomechanics models. Computers & Geosciences, Band 108 (Tagungsband des 5. TOUGH-Symposiums, 28.-30. September 2015, Berkeley, Kalifornien, USA), Seiten 56-63, Elsevier.*
- Rutqvist, J.; Wu, Y.-S.; Tsang, C.-F.; Bodvarsson, G. (2002): A modeling approach for analysis of coupled multiphase fluid flow, heat transfer, and deformation in fractured porous rock. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, Band 39(4), Seiten 429-442, Elsevier.*
- Rutqvist, J.; Tsang, C.-F. (2003): TOUGH-FLAC: A numerical simulator for analysis of coupled thermal-hydrologic-mechanical processes in fractured and porous geological media under multi-phase flow conditions. Online-Veröffentlichungen zum 1. TOUGH-Symposium, 12.-14. Mai 2003, Berkeley, Kalifornien, USA.*
- Rutqvist, J.; Moridis, G. (2008): Development of a Numerical Simulator for Analyzing the Geomechanical Performance of Hydrate-Bearing Sediments. Tagungsband zum 42. „U.S. Rock Mechanics Symposium“ der ARMA, 29. Juni-2. Juli 2008, San Francisco, Kalifornien, USA, Paper 139.*
- Rutqvist, J.; Vasco, D.W.; Myer, L. (2009): Coupled reservoir-geomechanical analysis of CO<sub>2</sub> injection at In Salah, Algeria. Energy Procedia, Band 1 (Tagungsband der 9. Konferenz „Greenhouse Gas Control Technologies“, 16.-20. November 2008, Washington D.C., USA), Seiten 1847-1854, Elsevier.*
- Rutqvist, J.; Ijiri, Y.; Yamamoto, H. (2011): Implementation of the Barcelona Basic Model into TOUGH-FLAC for simulations of the geomechanical behavior of unsaturated soils. Computers & Geosciences, Band 37(6) (Tagungsband des 3. TOUGH-Symposiums, 14.-16. September 2009, Berkeley, Kalifornien, USA), Seiten 751-762, Elsevier.*



- Rutqvist, J.; Kim, H.-m.; Ryu, D.-w.; Synn, J.-h.; Song, W.-k. (2012):* Modeling of coupled thermodynamic and geomechanical performance of underground compressed air energy storage in lined rock caverns. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, Band 52, Seiten 71-81, Elsevier.
- Rutqvist, J.; Jeanne, P.; Dobson, P.F.; Garcia, J.; Hartline, C.; Hutchings, L.; Singh, A.; Vasco, D.W.; Walters, M. (2016):* The Northwest Geysers EGS Demonstration Project, California – Part 2: Modeling and interpretation. *Geothermics*, Band 63, Seiten 120-138, Elsevier.
- Rycroft, C.H. (2009):* VORO++: A three-dimensional Voronoi cell library in C++. *041111. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, Band 19(4), American Institute of Physics Publishing, Melville, New York, USA.
- Schäfers, A.; Gens, A.; Rodríguez Dono, A.; Carta, G.; Gordon, A.; Holton, D.; Malmberg, D.; Sawada, M.; Qiao, Y.; Ferrari, A.; Laloui, L.; Sjöland, A. (2017):* Code Comparison of Coupled THM Processes in Engineered Barriers Performed within the Task Force on Engineered Barrier Systems. Posterpräsentation auf dem internationalen Kick-off-Workshop zum Projekt BEACON, Lithuanian Energy Institute (LEI), 19.-20. Juni 2017, Kaunas, Litauen.
- Settari, A.; Mourits, F.M. (1998):* A coupled reservoir and geomechanical simulation system. *SPE 50939. SPE Journal* 3(3), Seiten 219-226, Society of Petroleum Engineers, Richardson, Texas, USA.
- StandAG (2013):* Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz – StandAG) vom 23. Juli 2013. Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle und zur Änderung anderer Gesetze, *Bundesgesetzblatt Teil I*, Jahrgang 2013, Nr. 41, Bonn. Zuletzt geändert durch Artikel 4 des Gesetzes zur Neuordnung der Verantwortung in der kerntechnischen Entsorgung vom 27. Januar 2017, *Bundesgesetzblatt Teil I*, Jahrgang 2017, Nr. 5.
- StandAG (2017):* Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz – StandAG) vom 5. Mai 2017. Gesetz zur Fortentwicklung des Gesetzes zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle und anderer Gesetze, *Bundesgesetzblatt Teil I*, Jahrgang 2017, Nr. 26, Bonn. Zuletzt geändert durch Artikel 2 Absatz 16 des Gesetzes zur



Modernisierung des Rechts der Umweltverträglichkeitsprüfung vom 20. Juli 2017, Bundesgesetzblatt Teil I, Jahrgang 2017, Nr. 52.

*Sugita, Y.; Kwon, S.-k.; Lee, C.-s.; Maßmann, J.; Pan, P.; Rutqvist, J. (2016): DECOVALEX-2015 project – Task B2 final report. TRITA-LWR.Report 2015:05. Abschlussbericht, KTH, Stockholm, Schweden.*

*Tsang, C.-F.; Stephansson, O.; Jing, L.; Kautsky, F. (2009): DECOVALEX Project: from 1992 to 2007. Environmental Geology, Band 57(6), Seiten 1221-1237, Springer-Verlag.*

*Tuminaro, R.S.; Heroux, M.A.; Hutchinson, S.A.; Shadid, J.N. (1999): Official Aztec User's Guide, Version 2.1. SAND99-8801J. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, Sandia National Laboratories, Albuquerque, Neumexiko, USA.*

*UPC (1994a–2017a): CODE\_BRIGHT User's Guide. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, UPC, Barcelona, Spanien. (Versionsauszug: 1994 Original, 2016 überarbeitet für Version 6.2, 2017 überarbeitet für Version 7.4)*

*UPC (2017b): CODE\_BRIGHT Tutorial Manual. Arbeitsanleitung in der Version vom März 2017, UPC, Barcelona, Spanien.*

*van Genuchten, M.T. (1980): A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. Soil Science Society of America Journal, Band 44(5), Seiten 892-898, Madison, Wisconsin, USA.*

*Wieczorek, K.; Behlau, J.; Heemann, U.; Masik, S.; Müller, C.; Raab, M.; Kuate Simo, E. (2014): VIRTUS – Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz. GRS-354. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E10890, GRS/BGR/DBETEC/IFF, Braunschweig.*

*Wolters, R. (2014): Thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Analysen zum Tragverhalten von Kavernen im Salinargebirge vor dem Hintergrund der Energieträgerspeicherung und der Abfallentsorgung. Heft Nr. 20 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, TUC, Clausthal-Zellerfeld. Dissertation.*

*Zhang, C.-L.; Rothfuchs, T.; Moog, H.; Dittrich, J.; Müller, J. (2004): Thermo-Hydro-Mechanical and Geochemical Behaviour of the Callovo-Oxfordian Argillite and the Opalinus Clay. GRS-234. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E9541, GRS, Braunschweig.*



- Zhang, C.-L.; Rothfuchs, T.; Jockwer, N.; Wieczorek, K.; Dittrich, J.; Müller, J.; Hartwig, L.; Komischke, M. (2007): Thermal Effects on the Opalinus Clay – A Joint Heating Experiment of ANDRA and GRS at the Mont Terri URL (HE-D Project). GRS-224. Abschlussbericht zum BMWA-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E9773, GRS, Braunschweig.*
- Zhang, C.-L.; Rothfuchs, T.; Dittrich, J.; Müller, J. (2008a): Investigations on Self-Sealing of Indurated Clay. GRS-230. Abschlussbericht zum BMWi-/EC-Forschungsvorhaben mit den Förderkennzeichen 02E9834 bzw. F16W-CT-2003-02389, GRS, Braunschweig.*
- Zhang, C.-L.; Czaikowski, O.; Komischke, M.; Wieczorek, K. (2014): Thermo-Hydro-Mechanical Processes in the Nearfield around a HLW Repository in Argillaceous Formations – Volume II: In-situ-Investigations and Interpretative Modelling. GRS-313. Teilbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E10377, GRS, Braunschweig.*
- Zhang, K.; Wu, Y.-S.; Pruess, K. (2008b): User's Guide for TOUGH2-MP—A Massively Parallel Version of the TOUGH2 Code. LBNL-315E. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, LBNL, Berkeley, Kalifornien, USA.*
- Zhao, J. (2017): Multiphysikalische Prozess- und Systemanalyse für geologische Tiefenlager im Tonsteingebirge in der Nachverschlussphase. Heft Nr. 22 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, TUC, Clausthal-Zellerfeld. Dissertation.*
- Zheng, L.; Rutqvist, J.; Birkholzer, J.T.; Liu, H.-H. (2015): On the impact of temperatures up to 200°C in clay repositories with bentonite engineer barrier systems: A study with coupled thermal, hydrological, chemical, and mechanical modeling. Engineering Geology, Band 197, Seiten 278-295, Elsevier.*
- Ziefle, G.; Matray, J.-M.; Maßmann, J.; Möri, A. (2017): Coupled hydraulic-mechanical simulation of seasonally induced processes in the Mont Terri rock laboratory (Switzerland). Swiss Journal of Geosciences (Special Issue: Mont Terri rock laboratory, 20 years of research), Band 110(1), Seiten 195-212, Springer-Verlag (Birkhäuser).*