

**Wissenschaftliche Berichte
FZKA-PTE Nr. 12**

Untertägige Entsorgung

**Neuntes Projektstatusgespräch zu FuE-Vorhaben auf
dem Gebiet der Entsorgung gefährlicher Abfälle in
tiefen geologischen Formationen**

15. und 16. Juni 2010 am KIT Campus Nord

**Projektträger Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE)**



Herausgeber:
Projektträger Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE)
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Hermann-von-Helmholtz-Platz 1
76344 Eggenstein-Leopoldshafen
Internet: www.ptka.kit.edu

Juli 2013



PTKA
Projektträger Karlsruhe
Karlsruher Institut für Technologie

Vorwort

Das erste Projektstatusgespräch zur untertägigen Entsorgung fand bereits 1994 in Braunschweig statt. Das nunmehr Neunte, veranstaltet im Karlsruher Institut für Technologie (Campus Nord), setzte die Reihe dieser Veranstaltungen fort, auf denen der aktuelle Stand der von PTKA betreuten BMWi- und BMBF-geförderten Forschungsprojekte Fachleuten aus Wissenschaft, Behörden und Industrie sowie weiteren interessierten Teilnehmern vorgestellt wird. Zum anderen sind sie aber auch ein Forum, auf dem Informationsaustausch zu vielen Themen der Entsorgungsforschung möglich ist, wodurch auch der wissenschaftliche und kollegiale Austausch gefördert wird.

Das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) und das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) fördern im Rahmen ihrer Zuständigkeiten anwendungsorientierte Grundlagenforschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle und zur untertägigen Ablagerung chemotoxischer Abfälle. Diese Forschung soll im Sinne der Vorsorgeforschung des Bundes zu fundierten wissenschaftlich-technischen Kenntnissen führen, die Voraussetzung und Grundlage dafür sind, dass die Sicherheit komplexer Endlagersysteme oder von Untertagedeponien beurteilt und über lange Zeiträume nachgewiesen werden kann.

Aufgrund der großen Anzahl der von PTKA-WTE betreuten Forschungsprojekte musste für die Veranstaltung eine Auswahl aus den in der Förderung befindlichen Vorhaben getroffen werden. Die vorgestellten Forschungsprojekte repräsentierten hierbei ein breitgefächertes fachliches Spektrum. Die FuE-Aktivitäten befassten sich neben der Weiterentwicklung des Sicherheitsnachweiskonzeptes, mit Untersuchungen zu wirtsgesteinsspezifischen Eigenschaften, weiterhin mit geochemischen Prozessen und deren Einfluss auf die Migration von Radionukliden bis hin zu experimentellen Arbeiten zur Entwicklung langzeitstabiler geotechnischer Barrieren.

Es ist erneut klar geworden, dass die Lösung der Aufgaben in der Endlager- und Untertagedeponieforschung nur multidisziplinär und interdisziplinär angegangen werden kann. Dabei hat sich der Ansatz, komplexe Fragestellungen in Verbänden zu bearbeiten, als sinnvoll und zielführend erwiesen.

Im vorliegenden Materialienband sind die Beiträge des 9. Projektstatusgesprächs zu BMWi- und BMBF-geförderten FuE-Projekten der Entsorgungsforschung zusammengefasst. Soweit die Autoren schriftliche Zusammenfassungen bereitgestellt haben, sind diese mit in die Sammlung aufgenommen worden.

Projektträger Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE)
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Dr. H. Bittdorf
Dr. H. Pitterich

Der vorliegende Materialienband dient der aktuellen Unterrichtung der auf dem Gebiet der Entsorgung radioaktiver Abfälle arbeitenden Institutionen und der zuständigen Behörden.

Verantwortlich für den Inhalt sind die Autoren. Das Karlsruher Institut für Technologie (KIT) übernimmt keine Gewähr insbesondere für die Richtigkeit, Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie die Beachtung privater Rechte Dritter.

Eine auszugsweise oder vollständige Vervielfältigung ist erlaubt, wenn die Zustimmung der betroffenen Autoren vorliegt.

Inhaltsverzeichnis

Dr. J. Krone.....	1
<i>Weiterentwicklung des Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Salzgestein am Beispiel des Standortes Gorleben</i>	
Dr. W. Filbert.....	58
<i>Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern – Abschluss des Projektes DENKMAL</i>	
Dipl.-Ing. W. Bollingerfehr.....	96
<i>Referenzkonzept für die Endlagerung Wärme entwickelnder radioaktiver Abfälle in Tongestein (ERATO)</i>	
K. Wieczorek.....	131
<i>Untersuchungen zum THM-Verhalten von Steinsalz und Tonstein mit Schwerpunkt EDZ</i>	
Dr. A. Hampel.....	185
<i>Vergleich aktueller Stoffgesetze für Steinsalz anhand von 3D-Modellberechnungen</i>	
Prof. Dr. H. Konietzky.....	221
<i>Heterogene Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag – Untersuchung und Modellierung von MgO-Beton und Asphalt</i>	
Dr. H. Pitterich.....	297
<i>BMBF-Förderbereich „Nukleare Sicherheitsforschung“</i>	
Prof. Dr. G. Wittum.....	309
<i>Modellierung thermohaliner Strömungen in geklüftet-porösen Medien</i>	
Dr. H. Moog.....	341
<i>Verbundprojekt THEREDA – Entwicklung einer thermodynamischen Referenzdatenbasis zur Beschreibung von geochemischen Prozessen in Untertagedeponien und Endlagern für radioaktive Abfälle</i>	
Dr. S. Krüger.....	372
<i>Verbund Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung und Sorption von Actiniden</i>	
Dr. Th. Wilsnack.....	395
<i>Zerstörungsfreie Permeabilitätsmessung</i>	
Dipl.-Ing. T. Rothfuchs.....	417
<i>Eignungsuntersuchung von Bentonit/Sand-Gemischen als Verschlussmaterial im Tonendlager</i>	
Dipl.-Geol. J. Gerardi.....	455
<i>Verbundprojekt Staßfurt II – Prozessanalyse und Prognose für Bergschadensgebiete</i>	
Veranstaltungsprogramm.....	486

Weiterentwicklung des Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Salzgestein

*J. Krone¹⁾, D. Buhmann²⁾, J. Hammer³⁾, S. Keller³⁾,
A. Lommerzheim¹⁾, J. Mönig²⁾, S. Mrugalla³⁾, J. R. Weber³⁾, J. Wolf²⁾*

¹⁾ DBE TECHNOLOGY GmbH, Peine

²⁾ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig

³⁾ Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover

1 Einleitung

Im Zusammenhang mit der Aufhebung des Moratoriums zur Erkundung des Salzstockes Gorleben hat Bundesumweltminister Röttgen am 15. März 2010 die Aufgabe gestellt, bis zum Ende dieser Legislaturperiode eine vorläufige Sicherheitsanalyse zum Standort Gorleben zu erstellen und einem internationalen Peer Review zu unterziehen. In Übereinstimmung mit dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik und der bewährten Praxis bei weit fortgeschrittenen Endlagerprojekten für hochradioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente in anderen Ländern, soll damit ein entscheidendes, bisher noch fehlendes Element zur Bewertung der Sicherheit und Realisierbarkeit eines Endlagers im Salzstock Gorleben hinzugefügt werden.

In Deutschland erfolgten vorläufige Sicherheitsbetrachtungen zu einem Endlager hochradioaktiver Abfälle in Salzformationen, einschließlich der Untersuchung ihrer technischen Machbarkeit, Anfang der 80er bis Mitte der 90er Jahre in verschiedenen Systemstudien (Andere Entsorgungstechniken – SAE (1984) /1/, Systemanalyse Mischkonzept – SAM (1989) /2/, Systemanalyse Endlagerkonzepte (1996) /3/). Die 1997 begonnenen methodischen Arbeiten für eine vorläufige Sicherheitsanalyse auf der Grundlage der im Erkundungsbereich 1 und der anderen bis dahin über- und untertägig gewonnenen geowissenschaftlichen Erkenntnisse zum Salzstock Gorleben wurden 1999 noch vor Inkrafttreten des Erkundungsmoratoriums durch das Bundesamt für Strahlenschutz (BfS) abgebrochen. Zwischenzeitlich sind durch die weitere Auswertung der Erkundungsergebnisse, durch eine Reihe von FuE-Arbeiten und die Planungen zur Stilllegung des Endlagers Morsleben (ERAM) maßgebliche Erkenntnisse hinzugekommen, die entscheidenden Einfluss auf die Bewertung und den Nachweis der Sicherheit eines Endlagers in einem Salzstock haben. Ferner wurden die seit 1983 geltenden Endlagersicherheitskriterien weiterentwickelt.

Vor diesem Hintergrund beauftragte das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie, vertreten durch den Projektträger Karlsruhe, 2005 die BGR (Hannover), die DBE TECHNOLOGY GmbH (Peine) und die GRS (Braunschweig) mit dem FuE-Vorhaben „Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW – ISIBEL“. Im Rahmen dieser im März 2010 abgeschlossenen Arbeiten wurden ein neuer methodischer Ansatz zum Nachweis der Endlagersicherheit entwickelt und exemplarisch für ein HAW-Endlager an einem Referenzstandort (angelehnt an den Salzstock Gorleben) umgesetzt sowie Empfehlungen für noch erforderliche vertiefende Untersuchungen abgeleitet. Der Kern dieses Ansatzes besteht darin, dass statt der bisher üblichen Be-

trachtung eines als abdeckend angesehenen Freisetzungsszenariums ein systematischer Nachweis des sicheren Einschlusses der eingelagerten Abfälle geführt und damit den eigentlichen Vorzügen einer Endlagerung im Salzgestein besser Rechnung getragen wird.

Mit den Ergebnissen dieser während des Gorleben-Moratoriums durchgeführten Arbeiten steht für die vom Bundesumweltminister gestellte Herausforderung zur Erstellung einer vorläufigen Sicherheitsanalyse in ca. 2,5 Jahren nicht nur die weitgehend erprobte Methodik sowie eine Vielzahl praktisch sofort verwertbarer Ergebnisse, sondern auch ein qualifiziertes Team zur Verfügung.

2 Motivation

In den vergangenen vier Jahrzehnten erfolgten in den deutschen Forschungseinrichtungen wie auch in den mit der Endlagerung radioaktiver Abfälle befassten Institutionen umfangreiche Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zu konzeptionellen und sicherheitstechnischen Fragen der Endlagerung ausgedienter Brennelemente und anderer hochradioaktiver Abfälle (HAW).

Eine weitgehend in sich geschlossene Betrachtung für ein Endlager hochradioaktiver Abfälle in Salzformationen im Sinne einer „Total System Performance Assessment“ bestehend aus

- Charakterisierung und Beschreibung der geologischen Formation
- Entwicklung des technischen Endlagerkonzeptes und Bewertung seiner technischen Realisierbarkeit und
- Betriebs- und langzeitsicherheitsliche Bewertung

erfolgte in der Vergangenheit in den FuE-Vorhaben

- Systemstudie „Andere Entsorgungstechniken“ - SAE (1984) /1/
- Systemanalyse Mischkonzept - SAM (1989) /2/
- Systemanalyse Endlagerkonzepte - SEK (1996) /3/

Im Zusammenhang mit der Eignungsbewertung des Salzstockes Gorleben wurde im Auftrag des Bundesamtes für Strahlenschutz 1997/98 ein Konzept für das Endlager Gorleben mit dem Titel „Aktualisierung des Konzepts Endlager Gorleben“ /4/ erstellt. Es beinhaltet neben der Beschreibung des Standortes eine auf dem damals unterstellten Abfallmengengerüst aufbauende vorkonzeptionelle Planung des Endlagers.

Darüber hinaus wurden 1997 methodische Arbeiten für eine vorläufige Sicherheitsanalyse aufgenommen, die beispielhaft für einen Einlagerungsbereich unterhalb des Erkundungsbereiches 1 im Salzstock Gorleben durchgeführt werden sollten. Im Vorfeld des Erkundungsmoratoriums wurden diese Arbeiten bereits 1999 wieder eingestellt.

In der Vergangenheit wurden im Rahmen von Langzeitsicherheitsbetrachtungen für HAW-Endlager im Steinsalz vorrangig konservative Freisetzungsszenarien betrachtet. Dabei er-

folgte keine Unterscheidung zwischen wahrscheinlichen und gering wahrscheinlichen Entwicklungen des Endlagersystems und es wurde ausschließlich seine gestörte Entwicklung untersucht. Als typisches Beispiel für ein betrachtetes, konservatives Szenario ist das sogenannte Anhydritszenario zu nennen, bei dem die Existenz einer durchgängigen Wegsamkeit über den Hauptanhydrit vom Einlagerungsbereich bis zum Deckgebirge unterstellt wurde, über die Lösungen bis zu den Abfällen eindringen und gelöste Radionuklide in das Deckgebirge und schließlich in die Biosphäre freigesetzt werden können.

Die vorrangige Betrachtung von konservativen Freisetzungsszenarien hat den gravierenden Nachteil, die Vorzüge von Salz als Wirtsgestein und einschlusswirksame geologische Hauptbarriere nicht genügend herauszustellen. Diese Vorgehensweise hat zu Verwirrungen in der Fachöffentlichkeit geführt und die Vermittelbarkeit der Vorzüge und des Sicherheitskonzeptes der Endlagerung im Steinsalz erheblich erschwert. Beispielhaft kann hier auf die stilisierte Darstellung eines Anhydritszenarios verwiesen werden, bei dem die Einlagerungsbohrlöcher den Hauptanhydrit direkt durchstoßen, der in der Gorlebener Rinne endet (Abbildung 1) /5/.

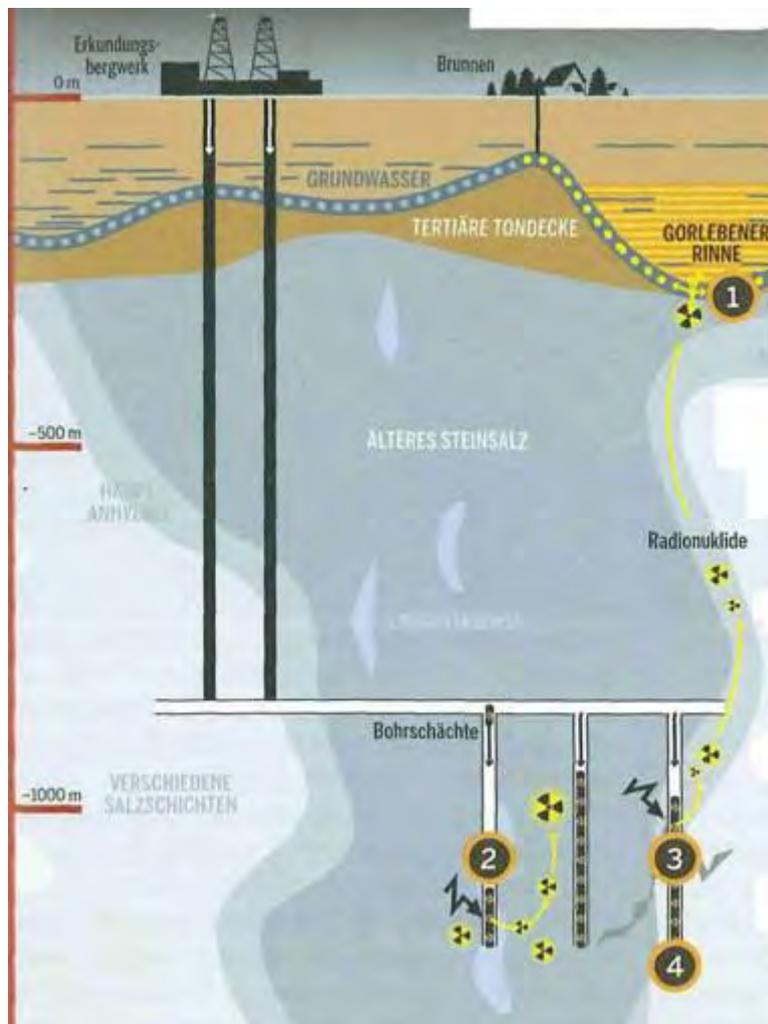


Abbildung 1: Beispiel für eine falsche schematisierte Darstellung der Geologie des Standortes Gorleben und des Endlagerkonzeptes (Anhydritszenario)

In jüngster Zeit ist eine Reihe von Arbeiten zu verzeichnen, die zu wichtigen Forschungsergebnissen und damit zu einem substanziellen Kenntniszugewinn führten, der die Entwicklung eines Referenzkonzeptes für ein Endlager im Salz sowie seine sicherheitstechnische Bewertung nachhaltig beeinflusst.

Hervorzuheben sind in diesem Zusammenhang insbesondere:

- Detaillierte Kenntnisse zum Aufbau der inneren Struktur des Salzstockes Gorleben im Ergebnis der untertägigen Erkundung
- Verbesserung des Kenntnisstandes zu Vorkommen, Verteilung und Genese von Lösungsvorkommen im Salzstock Gorleben auf der Grundlage einer detaillierten wissenschaftlichen Auswertung des „Lösungsverzeichnisses Gorleben“
- Entwicklung geomechanischer Nachweisverfahren zur Integrität der Salzbarriere unter Verwendung von Dilatanzkriterien und des Fluid- bzw. Minimalspannungskriteriums
- Optimierte thermomechanische Endlagerauslegung unter Verwendung abgesicherter Stoffgesetze und Codes zur 3 D-Modellierung
- Abschluss des Großversuches TSS (Projekt „Bambus“) und Beschreibung des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus
- Demonstration des Schachtverschlusskonzeptes am Beispiel Bohrschacht Salzdetfurth II
- Entwicklung ingenieurtechnischer Sicherheitsnachweisconzepte für Streckenverschlüsse im Zuge der Planungen zur Stilllegung des ERAM
- Arbeiten zur Optimierung der „Direkten Endlagerung“ ausgedienter Brennelemente durch Demonstration der Kokillenlagerung in Bohrlöchern
- Vertiefte Kenntnisse zur Mobilisierung und Rückhaltung von Radionukliden sowie zu deren Transport im Nahbereich und in der Geosphäre
- Weiterentwicklung der Programme zur Modellierung und Bewertung von Radionuklidausbreitungsprozessen und deren Koppelung mit thermodynamischen Datenbanken
- Weiterentwicklung des (rechentechischen) Instrumentariums für die Beschreibung von Endlagerteilsystemen und für die integrierte Systembetrachtung

Unter Berücksichtigung internationaler Entwicklungen wurden die Sicherheitsanforderungen für die Endlagerung radioaktiver Abfälle weiterentwickelt /6/. Hervorzuheben sind dabei insbesondere die neu eingeführte Unterscheidung zwischen wahrscheinlichen, gering wahrscheinlichen und unwahrscheinlichen Szenarien. Diese Unterscheidung ist insbesondere für die Endlagerung im Salz von großer Bedeutung, da hier bei wahrscheinlichen Entwicklungen des Endlagers der vollständige Einschluss angestrebt wird und Freisetzungen nur bei gering bzw. unwahrscheinlichen Szenarien einer gestörten Endlagerentwicklung zu besorgen sein sollten.

Vor dem Hintergrund dieser Entwicklungen ist es naheliegend, basierend auf dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik, eine kritische Bestandsaufnahme bezüglich der Instrumentarien zur sicherheitlichen Bewertung und zur Methodik der Führung des Sicherheitsnachweises vorzunehmen, um die Schwerpunkte zukünftiger FuE-Arbeiten für die HAW-Endlagerung in Salzgestein anhand eines weiterentwickelten Sicherheits- und Nachweisconzeptes systematisch abzuleiten.

3 Neuer methodischer Ansatz für das Sicherheits- und Nachweiskonzept

Unter Berücksichtigung der zwischenzeitlich erzielten Fortschritte beim Nachweis der Integrität der geologischen Barriere und der geotechnischen Barrieren wurde daher im vorliegenden FuE-Vorhaben ein Nachweiskonzept entwickelt, das den Vorzügen und dem Sicherheitskonzept des sicheren Einschlusses voll Rechnung trägt (Abbildung 2):

- Im Mittelpunkt des Langzeitsicherheitsnachweises steht der Nachweis des langfristig sicheren Einschlusses der endgelagerten Abfälle durch den Nachweis der Integrität der geotechnischen Barrieren und der geologischen Hauptbarriere.
- Die Bewertung von Freisetzungen erfolgt für diejenigen Entwicklungen des Endlagersystems, für die eine Beeinträchtigung der Integrität des Barrierensystems und damit eine Ausbildung eines durchgängigen Transportpfades nicht ausgeschlossen werden kann. Ob diese Entwicklungen wahrscheinlich, gering wahrscheinlich oder unwahrscheinlich sind, ist Ergebnis der Szenarienanalyse.

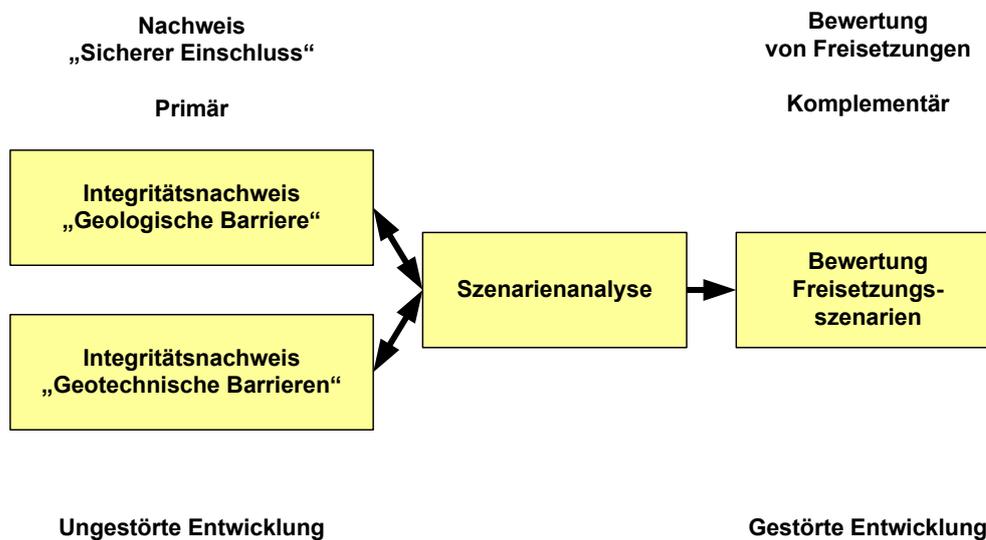


Abbildung 2: Methodischer Ansatz zum radiologischen Langzeitsicherheitsnachweis

Hinsichtlich der Auslegung des Endlagers beruht das verfolgte Sicherheitskonzept darauf, dass unter Berücksichtigung der vorgefundenen Geologie und der benötigten Einlagerungshohlräume und sonstigen Grubenbaue das Grubengebäude so ausgelegt wird, dass der Integritätsnachweis für die geologische Hauptbarriere, das Hauptsalz der Staßfurt-Folge (z2HS), geführt werden kann. Hierzu sind zur Einhaltung der Dilatanz- und Hydrofrac-Kriterien die Einlagerungshohlräume insbesondere in hinreichender Teufe und in hinreichendem Abstand zu potentiellen Störungszonen bzw. Schichtgrenzen anzuordnen. Das Temperaturkriterium von max. 200 °C gilt dabei als wesentliche Randbedingung.

Ferner wird von einer Verfüllung des gesamten Hohlraumvolumens sämtlicher Grubenbaue des Endlagerbergwerkes mit Salzgrus ausgegangen, der durch die Konvergenz kompaktiert wird. Dabei nimmt seine Porosität und Permeabilität ab, bis er langfristig die gleichen Barriereigenschaften wie Steinsalz aufweist.

Die Schächte und die Zugänge zu den Einlagerungsbereichen werden mit Schacht- bzw. Streckenverschlüssen verschlossen. Diese geotechnischen Barrieren sind dabei so anzuordnen und hinsichtlich ihres hydraulischen Widerstandes und der Langzeitstabilität so ausulegen, dass der Zutritt von Lösungen über den Schacht und die mit Salzgrus verfüllten Strecken zu den endgelagerten Abfällen und die anschließende Auspressung kontaminierter Lösungen über den gleichen Pfad infolge der abklingenden Konvergenz bei der ungestörten Endlagerentwicklung nicht mehr zu besorgen sind.

Unter Berücksichtigung der mit der Zeit abnehmenden Porosität und Permeabilität des kompaktierenden Salzgruses sind insbesondere die Anforderungen an die Langzeitstabilität und an den hydraulischen Widerstand der geotechnischen Barrieren so zu wählen, dass dieser Nachweis einer de facto Nullemission geführt werden kann. Die Einhaltung dieser Anforderungen ist wiederum in den ingenieurtechnischen Nachweisen zur Barrierenintegrität zu belegen (Abbildung 3).

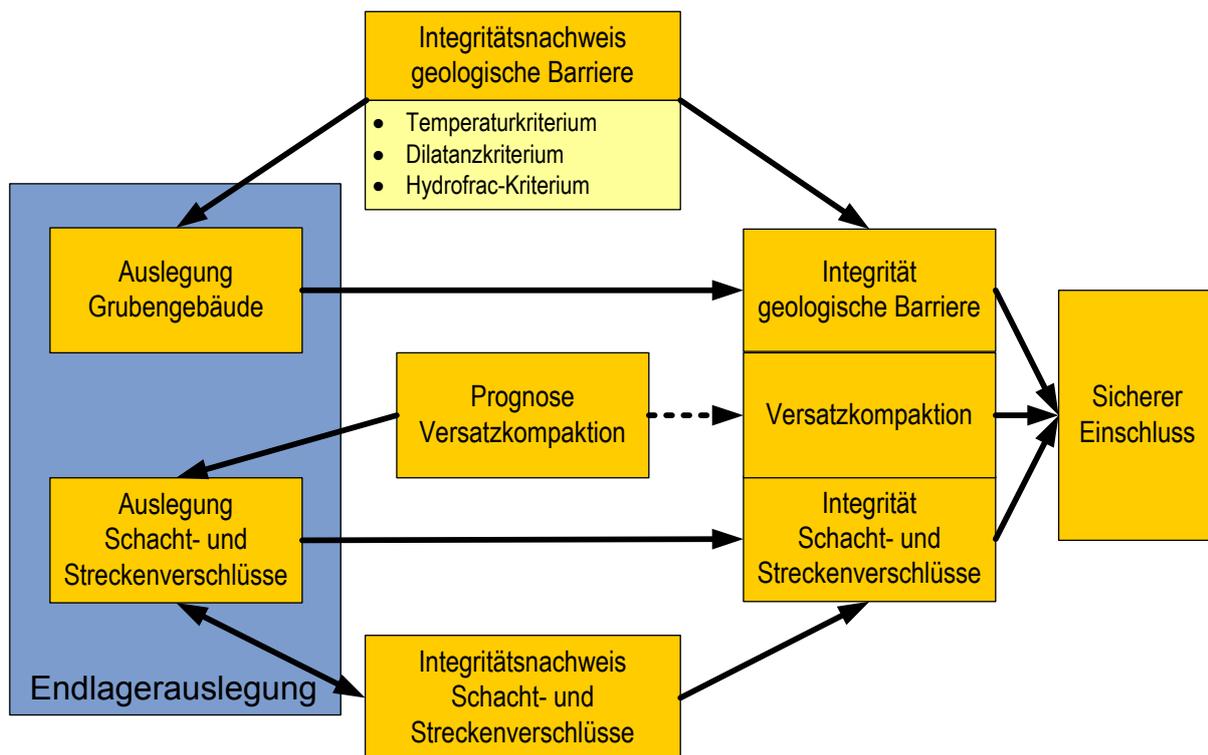


Abbildung 3: Sicherheitskonzept „Sicherer Einschluss“

4 Referenzkonzept

Der Ist-Zustand des Endlagersystems ist Ausgangspunkt für die Betrachtung möglicher zukünftiger Entwicklungen des Systems in Szenarienanalysen. Die Beschreibung des Ist-Zustandes bildet damit die Basis für die Sicherheitsbewertung des Endlagers.

Für ein HAW-Endlager im Wirtsgestein Salz wurde der hypothetische Ist-Zustand als Referenzkonzept mit den Teilen Endlagerkonzept und Standortmodell beschrieben.

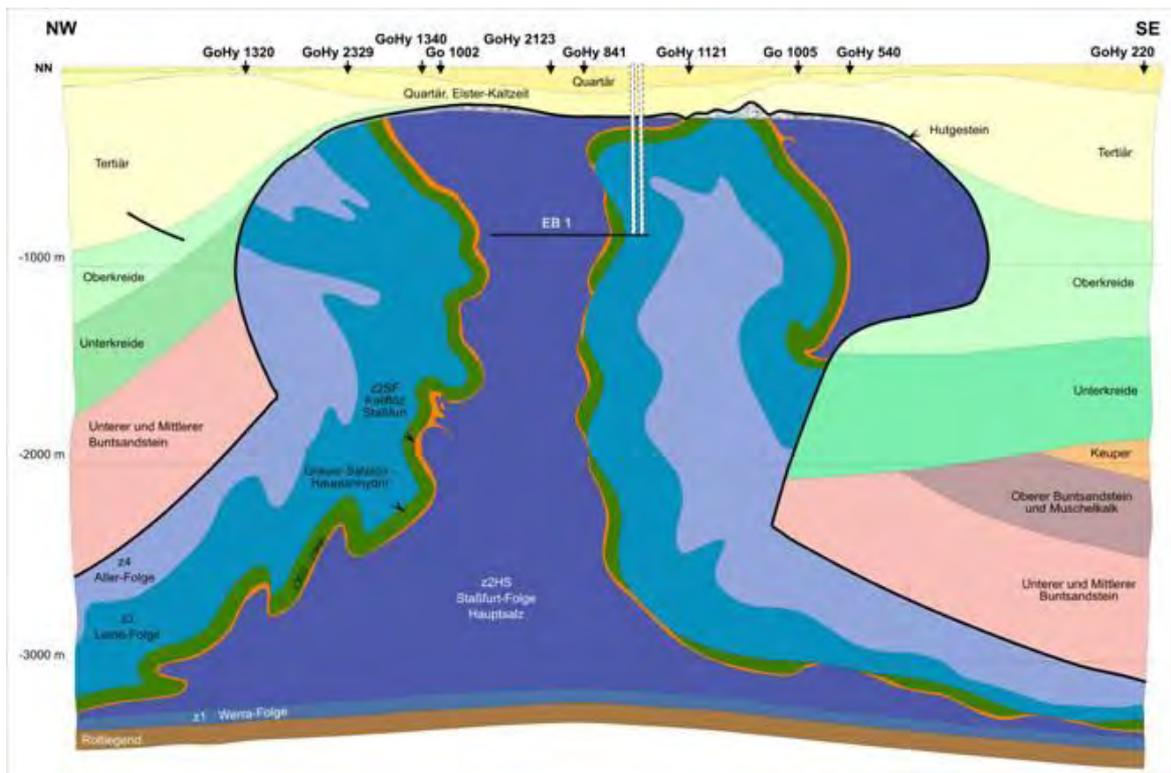


Abbildung 4: Schematisierter Vertikalschnitt durch den Salzstock Gorleben

Der unter Zugrundelegung eines möglichst konservativen Modellieransatzes als weitgehend durchgehender Strang gezeichnete Hauptanhydrit (dunkelgrün) ist in der Realität stark zerblockt (siehe z. B. Abb. 5). Die Breite des Salzstocks beträgt im Topbereich ca. 4 km.

4.1 Geologisches Standortmodell

Die Beschreibung der Standortverhältnisse orientierte sich auf der Grundlage der Erkundungsergebnisse zu Gorleben am aktuellen Kenntnisstand zu norddeutschen Salzstöcken. Wichtige Datengrundlagen bildeten dabei die BGR-Berichte /7/, /8/, /9/ sowie eine Reihe von BGR-Berichten zur Ermittlung geotechnischer Kenngrößen des Wirtsgesteins Salz.

Das Standortmodell beinhaltet neben der Beschreibung einer repräsentativen Geometrie der Salzstruktur Aussagen zum Aufbau und zur strukturgeologischen Entwicklung des präsalina-

ren Untergrundes, des Wirtsgesteinskörpers und des Umfeldes sowie zu den tektonischen Verhältnissen.

Die für eine Langzeitsicherheitsanalyse relevanten und wesentlichen Inhalte aus dem im Ergebnis des ISIBEL-Projektes vorliegenden Referenzstandortmodell sind:

1. Am Referenzstandort steht ein Einlagerungsmedium (Hauptsalz) in der geforderten Tiefe von ca. 800 bis 1000 m für die Einlagerung von hochradioaktiven, wärmeentwickelnden Abfällen in ausreichender Menge und unverritz zur Verfügung (Abbildung 4).
2. Die Verteilung natürlicher Klüfte im Salzstock und der damit verbundenen Fluidvorkommen folgt bekannten Gesetzmäßigkeiten.
3. Der Hauptanhydrit ist in Schollen zerbrochen, die hydraulisch voneinander isoliert sind. Fluidmigrationen zwischen Einlagerungsbereichen und Deck- sowie Nebengebirge über den Hauptanhydrit sind daher nicht möglich (Abbildung 5).
4. Die Zusammensetzung, Genese und das Alter von Salzlösungsvorkommen innerhalb des Salzstocks sind bekannt und ihre Lage in Relation zu den neu aufzufahrenden Einlagerungsbereichen vorhersehbar. Der Bereich des Hauptsalzes ist nahezu frei von Lösungsvorkommen (Abbildung 6). Sie sind untereinander nicht vernetzt. Dies gilt ebenfalls für die im Hauptsalzsattel auftretenden Kohlenwasserstoffvorkommen.
5. Das Wirtsgestein befindet sich im chemischen Gleichgewicht mit den darin enthaltenen Fluiden. Im einschlusswirksamen Gebirgsbereich sind keine von außerhalb des Salzstocks eingedrungenen Gebirgsässer vorhanden.
6. Die Entwicklung des Salzstocks ist weitgehend abgeschlossen. Aufgrund der geringen Salzmächtigkeiten in den Randsenken und der tektonischen Verhältnisse im Standortgebiet muss mit nur geringen Aufstiegsraten innerhalb des Nachweiszeitraumes von einer Million Jahre gerechnet werden.
7. Die Integrität der Salzbarriere ist aus geologischer Sicht gewährleistet, da sich der Referenzstandort in einer tektonisch ruhigen Zone befindet und sich langfristig nur geringe Subrosionsraten geologisch herleiten lassen.
8. Die im Deckgebirge vorhandene Hydrodynamik bewirkt, dass das Deckgebirge im Gegensatz zum Hauptsalz als eine Barriere zu betrachten ist, die nur eine geringe Rückhaltefunktion für Radionuklide beinhaltet. Das Deckgebirge würde aufgrund der Grundwasserbewegungen einen Beitrag zur Verdünnung möglicher Radionuklidkonzentrationen in der Geosphäre leisten.

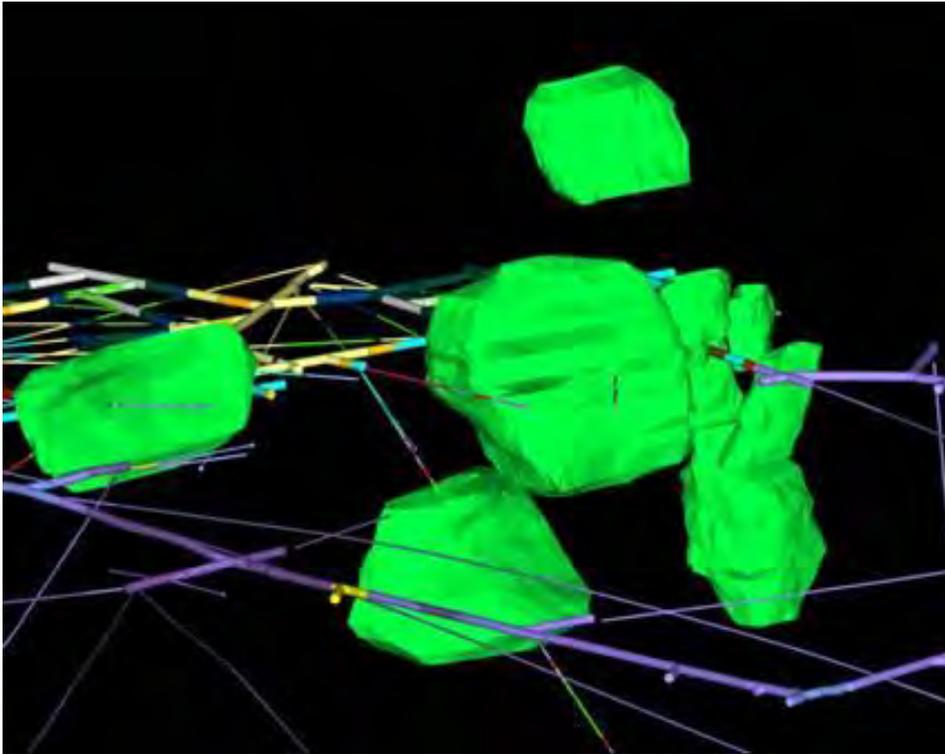


Abbildung 5: Zerblockung des Hauptanhydrits am Übergang Infrastrukturbereich – Staßfurt-Steinsalz im Bereich der 840 m-Sohle des Erkundungsbergwerkes Gorleben

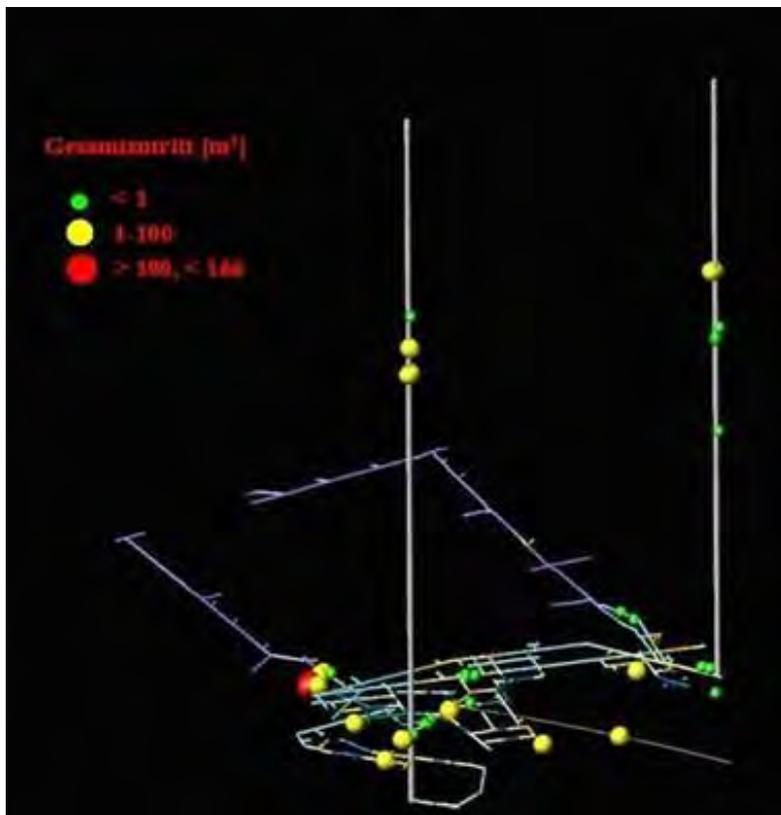


Abbildung 6: Verteilung der Lösungsvorkommen im Erkundungsbergwerk Gorleben

4.2 Konzeptionelle Endlagerplanung

Als weitere Grundlage für die Überprüfung des Instrumentariums zur sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern in einer Salzformation war eine konzeptionelle Endlagerplanung zu erstellen. Unter Berücksichtigung des aktuellen Standes von Wissenschaft und Technik sowie des zugrunde gelegten geologischen Standortmodells wurden hierzu die bisher verwendeten Referenzkonzepte für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in einer Salzformation weiterentwickelt.

In einem ersten Schritt wurde das endzulagernde Abfallaufkommen zusammengestellt und hinsichtlich des Mengengerüsts, des Radionuklidinventars, der Gebindeform und anderer sicherheitsrelevanter Merkmale beschrieben.

Die in diesem Vorhaben neu ermittelte endzulagernde Menge an hochradioaktiven wärmeentwickelnden Abfällen basiert auf dem Mengengerüst des Entwurfs des Nationalen Entsorgungsplans /10/. Es geht von der Beendigung der Nutzung der Kernenergie gemäß der Konsensvereinbarung zwischen der Bundesregierung und den Energieversorgungsunternehmen vom 14.06.2000 aus. Dieses Mengengerüst wurde durch Anfragen bei den Hauptablieferungspflichtigen aktualisiert und ist in der Tabelle 1 zusammenfassend dargestellt.

Tabelle 1: Mengengerüst der hochradioaktiven wärmeentwickelnden Abfälle

Endlagergebände	Anzahl
HAW-Kokille	3.767
CSD-B	560
CSD-C	6.902
POLLUX-Behälter oder Brennstabkokille (BSK)	2.045 oder 6.817
CASTOR AVR/THTR	459
CASTOR MTR 2	58
CASTOR KNK	4
Gesamt	13.795 oder 18.567

Im zweiten Schritt wurden Einlagerungstechniken für die jeweiligen Abfallarten beschrieben, wobei wiederum die sicherheitstechnischen Aspekte maßgeblich waren. Anhand von Überschlagsrechnungen und Analogieschlüssen wurde dann das Grubengebäude des Endlagerbergwerkes entworfen. Dabei wurden sowohl die „ausschließliche“ Bohrlochlagerung als auch die „gemischte“ Strecken- und Bohrlochlagerung betrachtet.

Für letztere wurde unter Zugrundelegung des vorgenannten Mengengerüsts und der Randbedingungen ein Grubengebäude für die Streckenlagerung von POLLUX-8-Behältern und die Bohrlochlagerung von HAW-Kokillen und CSD-C geplant. In Abbildung 7 ist das entsprechende Grubengebäude dargestellt.

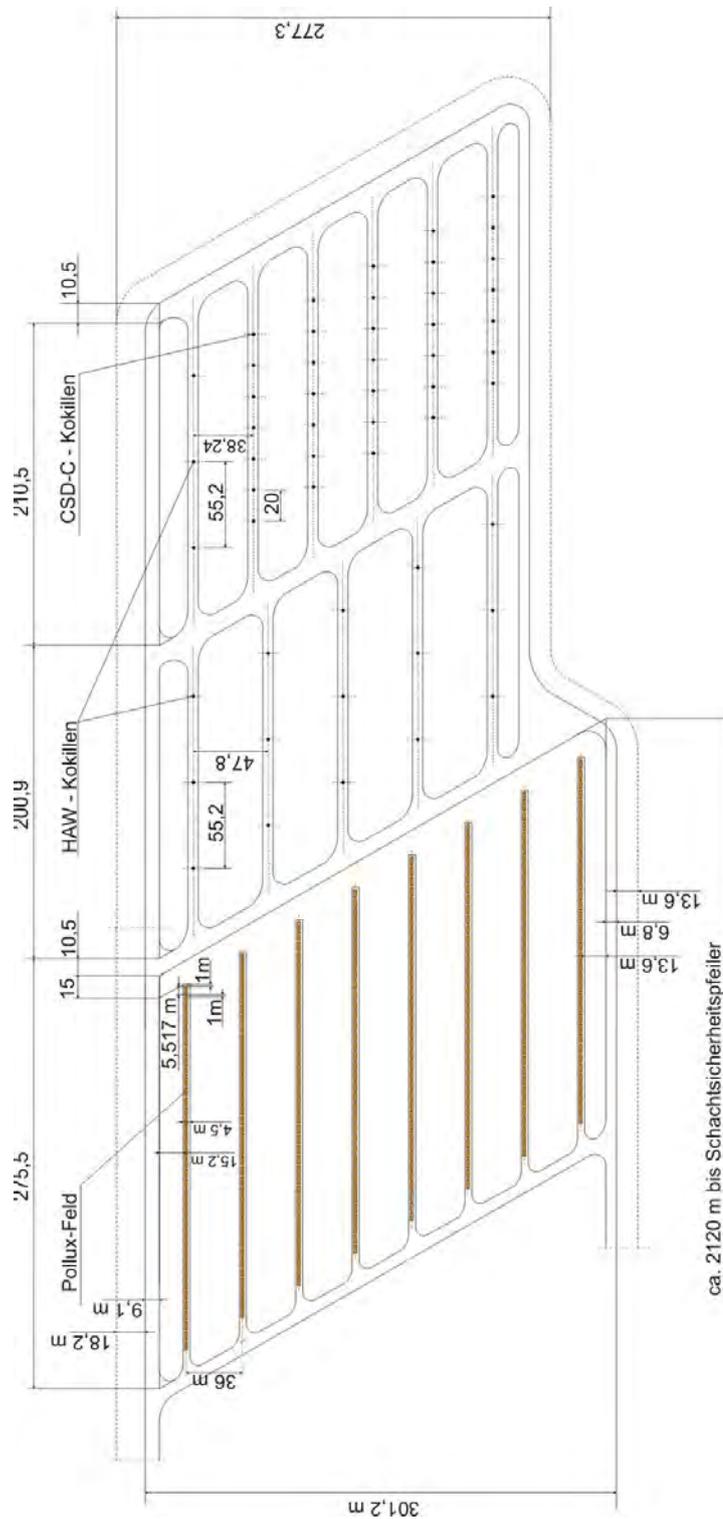


Abbildung 7: Grubengebäude für gemeinsame Strecken- und Bohrlochlagerung

Beim Konzept der „reinen Bohrlochlagerung“ in 300 m tiefen vertikalen Bohrlöchern werden die Brennstäbe von ausgedienten Brennelementen in Brennstabkokillen (BSK 3) verpackt. Unter Berücksichtigung des o. g. Mengengerüsts für HAW-Kokillen und CSD-C sowie BSK 3 werden insgesamt elf Einlagerungsfelder benötigt. Abbildung 8 zeigt dafür den Querschnitt eines vollständigen Grubengebäudes, bei dem die Felder wiederum mit einer Breite von ca. 300 m ausgelegt wurden. Bei Kenntnis der exakten geologischen Struktur in den potentiellen Einlagerungsbereichen kann diese Feldbreite angepasst werden.

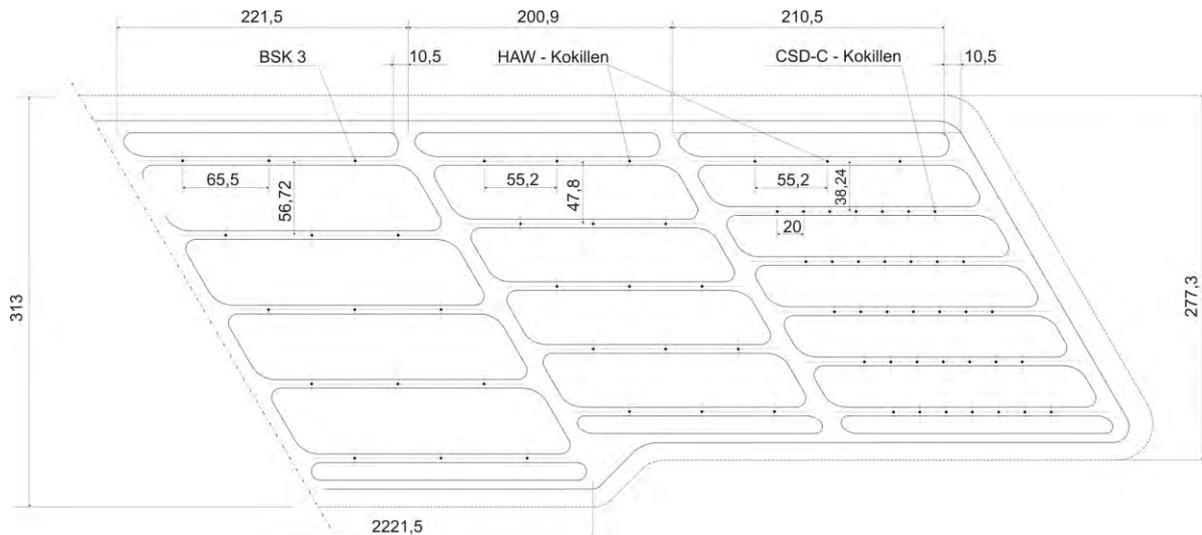


Abbildung 8: Grubengebäude für reine Bohrlochlagerung

Im Weiteren wurden die geotechnischen Komponenten des Mehrbarrierensystems entworfen und beschrieben.

5 Bewertung und Nachweis der Langzeitsicherheit

5.1 Nachweis des sicheren Einschlusses

5.1.1 Integritätsnachweis der geologischen Barriere

Für den Nachweis der Integrität der Salzbarriere werden neben der Bewertung der Eigenschaften des einschlusswirksamen Gebirgsbereiches selbst und der auf ihn einwirkenden geologischen Prozesse (s. Abschnitt 4.1) die Ergebnisse mechanischer bzw. thermomechanischer Modellberechnungen, z. B. unter Verwendung der Finite-Elemente-Methode, herangezogen.

Die Funktionstauglichkeit der Salzbarriere gilt als rechnerisch nachgewiesen, wenn eine Bildung von Wegsamkeiten aus geomechanischer Sicht ausgeschlossen werden kann. Dazu können nach dem derzeitigen wissenschaftlichen Kenntnisstand für die Bereiche mit kriechfähigem Salzgestein zwei Kriterien herangezogen werden /10/:

Dilatanzkriterium

Die Integrität ist gewährleistet, wenn keine Schädigung des Gebirges auftritt. In umfangreichen gesteinsphysikalischen Laboruntersuchungen an Steinsalz wurde nachgewiesen, dass Spannungszustände unterhalb der Dilatanzgrenze auch langfristig nicht mit Auflockerungen verbunden sind, so dass für Spannungen in diesem Bereich die Dichtheit des Salzgesteins gewährleistet ist. Erst Spannungszustände oberhalb der Dilatanzgrenze führen zu einer Auf-

lockerung des Mikrogefüges, wodurch bei Andauern des Zustandes allmählich ein Netzwerk von Mikrorissen entsteht.

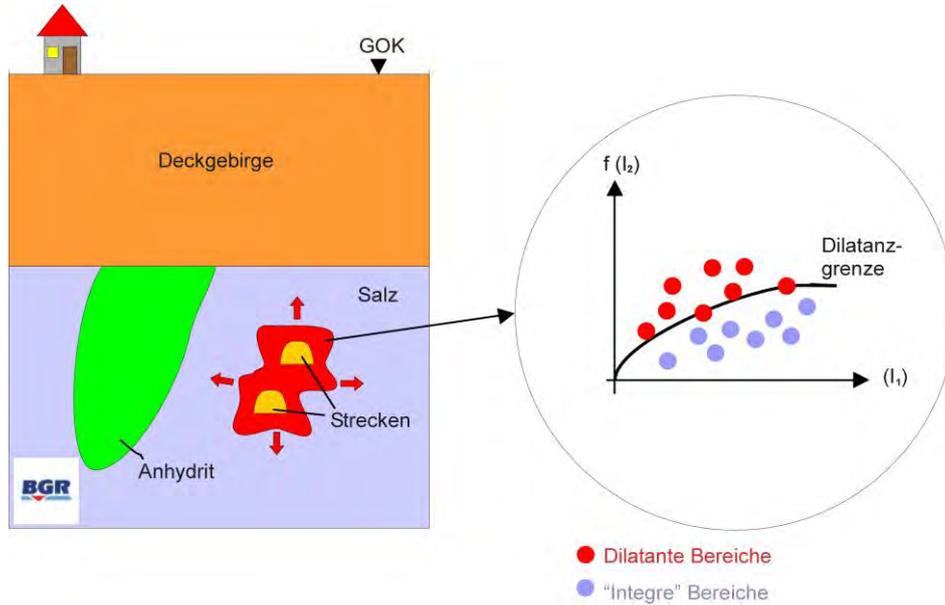


Abbildung 9: Visualisierung des Dilatanzkriteriums, dilatante Bereiche in der Barriere infolge bergmännischer Eingriffe

Laugendruckkriterium

Die Integrität ist gewährleistet, wenn die kleinste Hauptdruckspannung nicht unter den Wert des in der entsprechenden Teufe anzunehmenden hydrostatischen Drucks fällt. Dieser Druck ergibt sich aus einer hypothetischen, bis zur Geländeoberfläche reichenden Flüssigkeitssäule. Üblicherweise wird von einer Lösung mit einer Dichte von $1,2 \text{ kg/dm}^3$ ausgegangen.

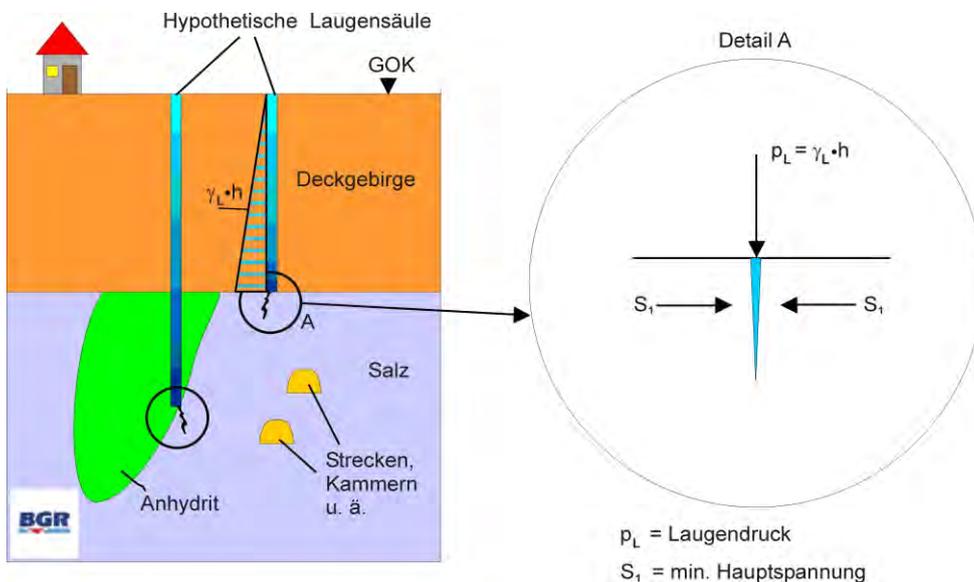


Abbildung 10: Visualisierung des Laugendruckkriteriums - Einwirkung von Laugendruck auf die geologische Barriere

5.1.2 Nachweiskonzept zur Integrität der geotechnischen Barrieren

Das Endlager- und Sicherheitskonzept sieht vor, dass die Schächte und die Zugänge zu den Einlagerungsbereichen mit Schacht- bzw. Streckenverschlüssen verschlossen werden. Diese geotechnischen Barrieren sind dabei so anzuordnen und auszulegen, dass der Zutritt der Lösungen über den Schacht und die mit Salzgrus verfüllten Strecken zu den endgelagerten Abfällen und die anschließende Auspressung kontaminierter Lösungen über den gleichen Pfad nicht zu besorgen sind. Im Zuge der Stilllegung und des Verschlusses des Endlagerbergwerkes wird das gesamte Hohlraumvolumen sämtlicher Grubenbaue des Endlagerbergwerkes mit Salzgrus versetzt, der durch die Konvergenz der Hohlräume im umgebenden Steinsalz kompaktiert wird. Dabei nimmt seine Porosität und Permeabilität ab, bis er langfristig vergleichbare Eigenschaften wie Steinsalz aufweist. Abhängig von der Kompaktion des Salzgrus und den daraus abzuleitenden Anforderungen an den hydraulischen Widerstand und die Lebensdauer der Schacht- und Streckenverschlüsse ergeben sich ggf. auch Anforderungen an die Bohrlochverschlüsse (Abbildung 11).

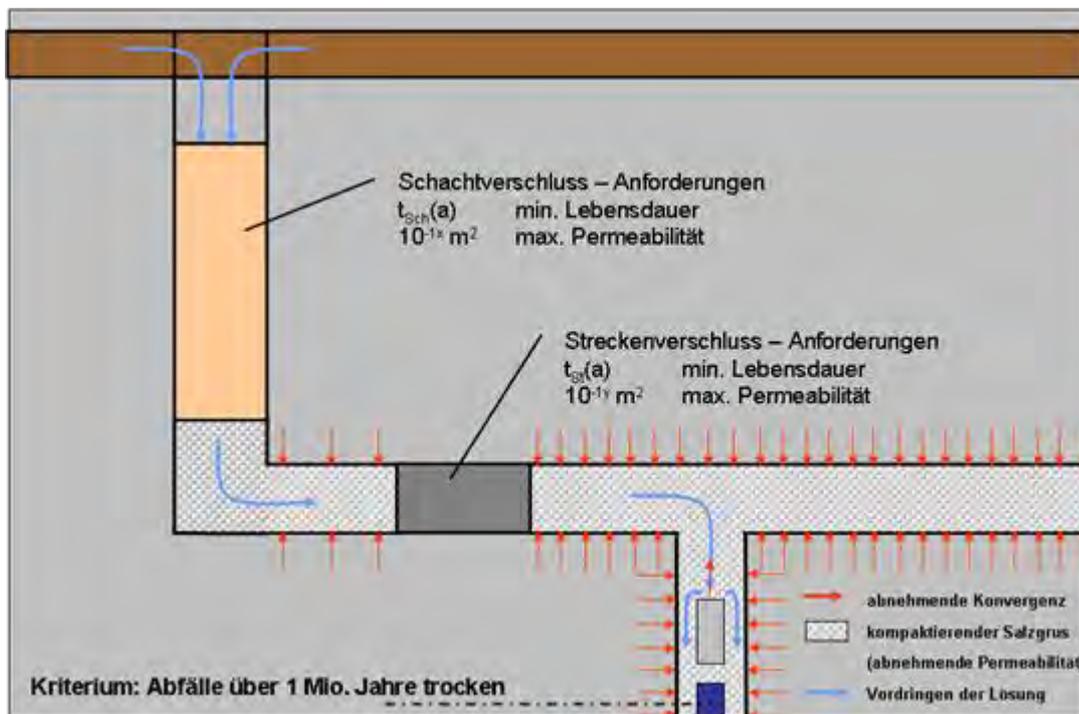


Abbildung 11: Vereinfachtes hydraulisches Schema zur Ableitung der Auslegungsanforderungen an die geotechnischen Barrieren

In Abbildung 12 ist die Struktur des Integritätsnachweises für geotechnische Bauwerke, wie sie entsprechend auch für die Stilllegung des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben durchgeführt wurde, dargestellt. Aus den hydraulischen Langzeitberechnungen werden Vorgaben an den hydraulischen Widerstand der Barrieren ermittelt. Für jede zu betrachtende Barriere muss dann der Nachweis der Standsicherheit, der Rissbeschränkung und der Dauerhaftigkeit geführt werden. Zudem ist auch der Nachweis der Herstellbarkeit zu führen. Die

Einhaltung des vorgegebenen hydraulischen Widerstands für Dichtkörper, Kontaktzone und Auflockerungszone ergibt dann zusammen mit den vorgenannten Nachweisen den Integritätsnachweis für das jeweilige geotechnische Bauwerk.

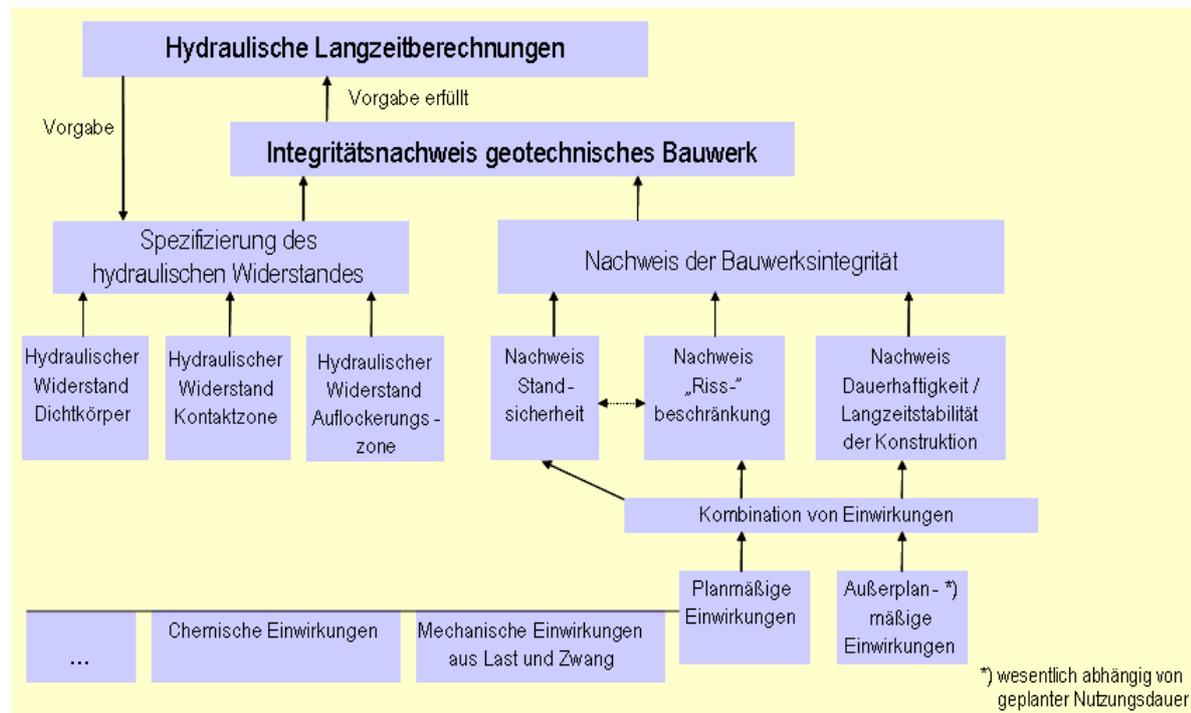


Abbildung 12: Struktur des Integritätsnachweises für geotechnische Barrieren

5.2 FEP-Generierung und Szenarientwicklung

Die Identifizierung und die anschließende quantitative Analyse und Bewertung von Szenarien, die jeweils eine der möglichen zukünftigen Entwicklungen des Endlagersystems darstellen, ist ein wesentlicher Bestandteil eines Langzeitsicherheitsnachweises für ein Endlager. Die einzelnen Szenarien werden durch Merkmale, Ereignisse und Prozesse (abgekürzt FEP, abgeleitet von den englischen Bezeichnungen Features, Events und Processes) charakterisiert, die die betrachtete zukünftige Entwicklung des Endlagersystems beeinflussen können.

Ausgehend von der geologischen Situation am Referenzstandort und dem Abfallspektrum wurde zum ersten Mal ein umfassender FEP-Katalog für ein HAW-Endlager im Wirtsgestein Salz erarbeitet.

Besondere Aufmerksamkeit wurde bei der Strukturierung der FEP-Beschreibungen Fragestellungen geschenkt, die für eine systematische Szenarientwicklung erforderlich sind. Hierzu zählen neben der Wirkung auf die Sicherheitsfunktionen der einschlusswirksamen Barrieren, die Klassifizierung nach der Eintrittswahrscheinlichkeit der FEPs und deren kausale Verknüpfung. Der auf diese Art und Weise in ISIBEL entwickelte ursprüngliche FEP-

Katalog wurde auf der Grundlage der Ergebnisse eines externen Reviews /12/ überarbeitet und in einer Datenbank organisiert (s. Abbildung 13).

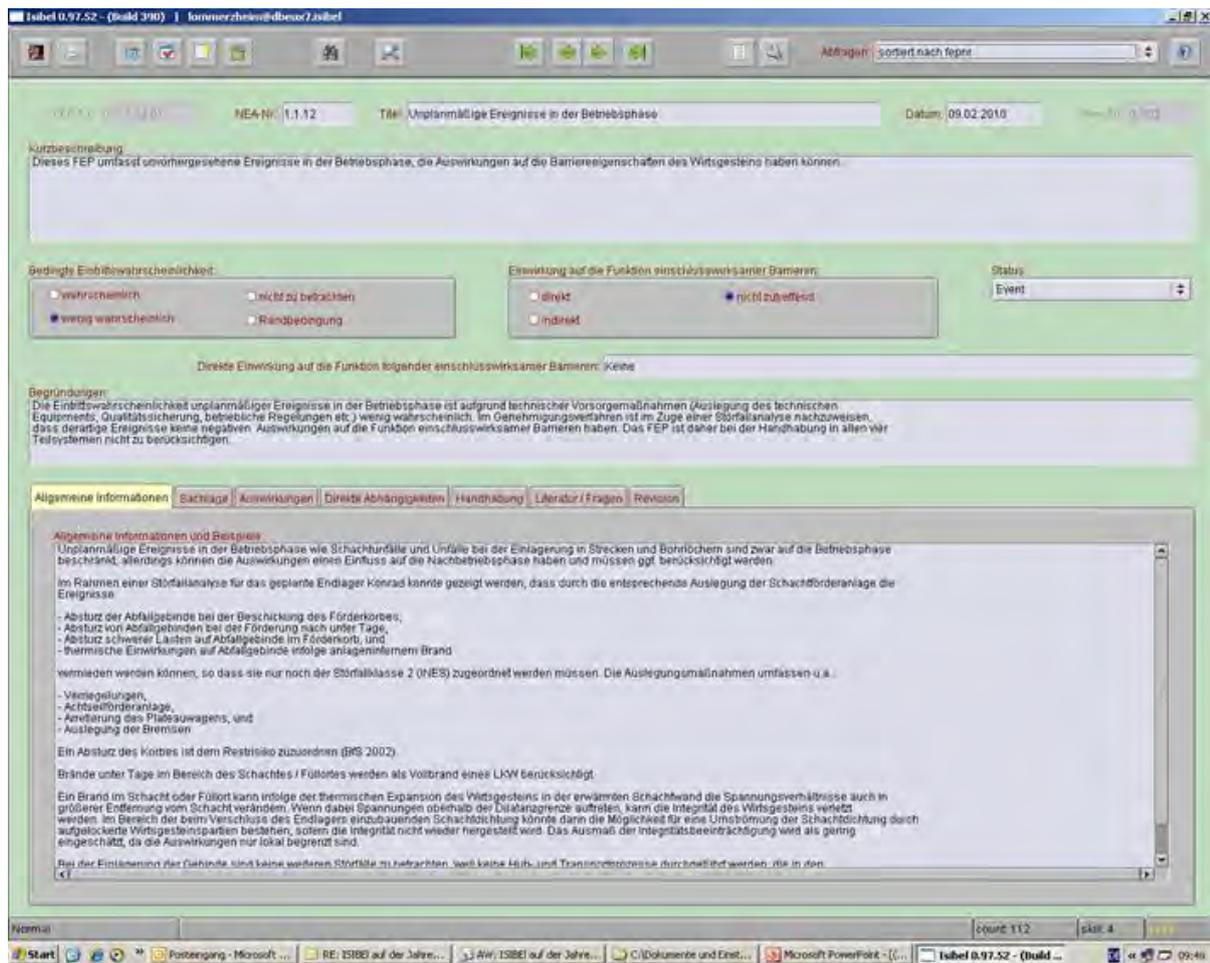


Abbildung 13: Eingabemaske der FEP-Datenbank

Auf der Grundlage dieses FEP-Katalogs wurde eine Methodik zur systematischen Ableitung und Beschreibung des Referenzszenarios entwickelt und deren Anwendbarkeit beispielhaft demonstriert. Es beschreibt dabei abdeckend hinsichtlich der Einwirkungen auf die Sicherheitsfunktionen der einschlusswirksamen Barrieren eine möglichst große Gesamtheit wahrscheinlicher Entwicklungen des Endlagersystems.

Bei der Endlagerauslegung beschreibt das Referenzszenario einerseits die Bedingungen für die Integritätsnachweise, die für die geologischen und geotechnischen Barrieren zu führen sind, um einen vollständigen Einschluss zu gewährleisten. Andererseits bildet es die Grundlage für die Ableitung von Alternativszenarios, die ggf. auch zu Freisetzungen von Radionukliden führen können. Den Ausgangspunkt hierfür bilden FEPs bzw. FEP-Ausprägungen, die geeignet sind, die Barrierenintegrität zu beeinträchtigen.

5.3 Bewertung nicht auszuschließender Freisetzungsszenarien

In Ergänzung zu den Arbeiten, die den Schwerpunkt auf die ungestörte Entwicklung des Endlagersystems legen, wurden beispielhaft einige Freisetzungsszenarien betrachtet, in denen Freisetzungen von Radionukliden aus den endgelagerten Abfällen nicht ausgeschlossen werden können. Für diese Szenarien wurden die FEPs identifiziert, die zu einer Beeinträchtigung einer oder mehrerer Barrieren führen können und den Prozessablauf im Endlagersystem charakterisieren.

Auf der Grundlage der Szenarientwicklung wurde ein Konzept entworfen, wie die radiologischen Konsequenzen aus den Szenarien hinsichtlich der Einhaltung von Schutzzielen für ein Endlager in einer Salzformation bewertet werden können. Das Konzept zur Bewertung der radiologischen Konsequenzen von gestörten Entwicklungen des Endlagersystems wurde in Anlehnung an bereits durchgeführte Langzeitsicherheitsanalysen zusammengestellt. Wesentliche Bestandteile dieses Konzeptes sind neben der bereits beschriebenen Entwicklung freisetzungsrelevanter Szenarien die Auswahl der für den Sicherheitsnachweis geeigneten Modelle und Rechenprogramme, die Anpassung dieser Modelle und Rechenprogramme an standortspezifische Gegebenheiten und die Ermittlung und Überprüfung aller Eingangsdaten.

Die so zusammengestellten Modellansätze für die Prozesse im einschusswirksamen Gebirgsbereich, im Fernfeld sowie in der Biosphäre wurden für die identifizierten Freisetzungsszenarien getestet und die Konsequenzen einer eventuellen Freisetzung analysiert.

Diese Arbeiten dienten jedoch nicht der Quantifizierung möglicher radiologischer Konsequenzen, sondern lediglich dem Test der entsprechenden Methodik.

6 Bewertung der Betriebssicherheit

Grundsätzlich wurde untersucht, wie die Einhaltung der Sicherheitsanforderungen des Bergbaus und des Strahlenschutzes einschließlich der Kritikalitätssicherheit im ungestörten Betrieb sowie bei Betriebsstörungen und Störfällen durch geeignete technisch-organisatorische Maßnahmen gewährleistet werden kann. Die Bewertung der Betriebssicherheit konzentrierte sich dabei auf die Identifizierung und Betrachtung von möglichen Schwachstellen und relevanten Störfällen. Es sollte festgestellt werden, inwieweit die Einhaltung der Anforderungen an die Betriebssicherheit technisch realisierbar ist oder bereits nachgewiesen wurde bzw. welche Defizite oder Konflikte noch bestehen, die durch zukünftige FuE-Arbeiten oder durch Änderungen des unterstellten Endlagerkonzeptes auszuräumen sind.

7 Nachweiskonzepte für die Einhaltung der nicht radiologischen Schutzziele in der Nachbetriebsphase

Neben der Einhaltung der radiologischen Schutzziele sind insbesondere der Schutz der Tagesoberfläche (Hebungen und Senkungen) und der Grundwasserschutz nachzuweisen.

7.1 Grundwasserschutz

Für ein HAW-Endlager im Salz wurde die Notwendigkeit einer wasserrechtlichen Erlaubnis für die Nachbetriebsphase analysiert und gleichzeitig geprüft, inwieweit Abschätzungen zu den Folgen einer nicht vollständig auszuschließenden gestörten Entwicklung erforderlich sind. Entsprechende Nachweiskonzepte wurden erstellt. Grundsätzlich wurde jedoch davon ausgegangen, dass an chemotoxischer Kontaminationen keine anderen Anforderungen gestellt werden als hinsichtlich Untertagedeponien für besonders überwachungsbedürftige (nicht radioaktive) Abfälle und dass der Besonderheit von möglichen radioaktiven Kontaminationen durch die Einhaltung der radiologischen Schutzziele hinreichend Rechnung getragen wird.

7.2 Schutz der Tagesoberfläche

Insbesondere unter Berücksichtigung der notwendigen bergbaulichen Auffahrungs- und späteren Versatzmaßnahmen, sowie der thermomechanischen Konsequenzen aus der Einlagerung wärmeerzeugender Abfälle war zu prüfen, ob der Ausschluss von Tagesbrüchen und die Einhaltung einer noch akzeptierbaren Schiefstellung von $< 1/600$ in 100 Jahren nachgewiesen werden kann.

Tagesbrüche können dank des geringen Durchbauungsgrades und der zeitnahen Verfüllung der Grubenbaue mit einfachen geomechanischen Ansätzen ausgeschlossen werden. Unzulässige Schiefstellungen sind gleichfalls wegen der relativ großräumigen Hebungen und Senkungen in der thermischen Phase nicht zu erwarten. Eine Überprüfung ist mit einfachen geomechanischen Rechnungen möglich.

8 Resümee

Mit den hier zusammengefasst vorgestellten und in den entsprechenden Berichten ausführlich dargelegten Ergebnissen /13/ wurde auf der Grundlage des aktuellen Standes von Wissenschaft und Technik ein weitreichendes Konzept zum Nachweis und zur Bewertung der Sicherheit eines HAW-Endlagers in einem Salzstock erarbeitet und bereits exemplarisch unter Verwendung von standortspezifischen Daten zum Salzstock Gorleben getestet. Aus Sicht der Autoren stellen sie eine wesentliche Grundlage für eine vorläufige Sicherheitsanalyse dar, um zu prüfen inwieweit der Standort nach dem gegenwärtigen Kenntnisstand geeignet ist.

9 Literatur

- /1/ Systemstudie Andere Entsorgungstechniken, Kurzfassung, KWA Nr. 2190/1, Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Dezember 1984
- /2/ Systemanalyse Mischkonzept, Abschlussbericht Hauptband, KWA Nr. 2190A1, Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1989
- /3/ Systemanalyse Endlagerkonzepte, Abschlussbericht – BMFT FuE-Vorhaben FKZ 02E820, Hauptband, DEAB T59, DBE, 1996
- /4/ Filbert, W.; Engelmann, H.-J.: Aktualisierung des Konzeptes Endlager Gorleben; Abschlussbericht, Rev. 01, Peine, 1998, unveröffentlicht
- /5/ Petermann, J.: Sichere Energie im 21. Jahrhundert, Hamburg, 2006, Hoffmann und Campe
- /6/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit: Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle BMU, Berlin, Juli 2009
- /7/ Bornemann, O.; Behlau, J.; Keller, S.; Mingerzahn, G. & Schramm, M. (2004): Projekt Gorleben, Standortbeschreibung Gorleben - Teil III: Ergebnisse der Erkundung des Salinars. Abschlussbericht zum AP G 412110000.-- BGR, unveröffentl. Ber.: 222 S., 29 Abb., 6 Tab., 4 Anl., 1 Anh.; Hannover.
- /8/ Klinge, H., Boehme, J., Grisseemann, C., Houben, G., Ludwig, R. R., Schelkes, K. & Schildknecht, F. (2004): Projekt Gorleben, Standortbeschreibung, Teil II: Deckgebirge Hydrogeologie. Abschlussbericht zum Arbeitspaket 9G3411800000, BGR, unveröffentl. Ber.: 295 S., 95 Abb., 18 Tab., 12 Anh.; Hannover.
- /9/ Zirngast, M., Zwirner, R., Bornemann, O., Fleig, S., Hoffmann, N., Köthe, A., Krull, P. & Weiss, W. (2003): Projekt Gorleben. Schichtenfolge und Strukturbau des Deck- u. Nebengebirges. Abschlussbericht, BGR, unveröffentl. Ber.: 570 S., 42 Abb., 32 Tab., 195 Anl., 1 Anh.; Hannover.
- /10/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, Projektgruppe Nationaler Entsorgungsplan, RS III 2-13200/1, Arbeitsgrundlage Nationaler Entsorgungsplan für radioaktive Reststoffe, November 2003 (s. 50, 56, 105)
- /11/ Heusermann, S. (2001): Beurteilung der geomechanischen Stabilität und Integrität von Endlagerbergwerken im Salzgebirge auf der Grundlage geologischer und ingenieurgeologischer Untersuchungen. Geologische Beiträge Hannover, 2, 159-174.
- /12/ Röhlig, K.-J.; Appel, D; Kienzler, B.; Lux, K.-H.; Odoj, R.; Plischke, E.: Review des im Vorhaben „Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW“ (ISIBEL) erstellten FEP-Katalogs – Abschlussbericht, TU Clausthal
- /13/ Buhmann, D.; Mönig, J.; Wolf, J.; Heusermann, S.; Keller, S.; Weber, J.R.; Bollingerfehr, W.; Filbert, W.; Kreienmeyer, M.; Krone, J.; Tholen, M.: Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW (ISIBEL) - Abschlussbericht. DBE TECHNOLOGY GmbH, 2008

Weiterentwicklung des Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Salzgestein

*J. Krone¹⁾, D. Buhmann²⁾, J. Hammer³⁾, S. Keller³⁾,
A. Lommerzheim¹⁾, J. Mönig²⁾, S. Mrugulla³⁾, J. R. Weber³⁾, J. Wolf²⁾*

¹⁾DBE TECHNOLOGY GmbH, Peine

²⁾ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig

³⁾ Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover

**Ergebnisse des FuE-Vorhabens:
“Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums
für eine Sicherheitliche Bewertung von HLW-EndLagern”
- **ISIBEL** -**

FuE-Vorhaben ISIBEL

Zielstellung:

- Ermittlung FuE-Bedarf zur HAW-Endlagerung im Salz anhand der

Weiterentwicklung des Sicherheitsnachweiskonzeptes

Projektpartner:

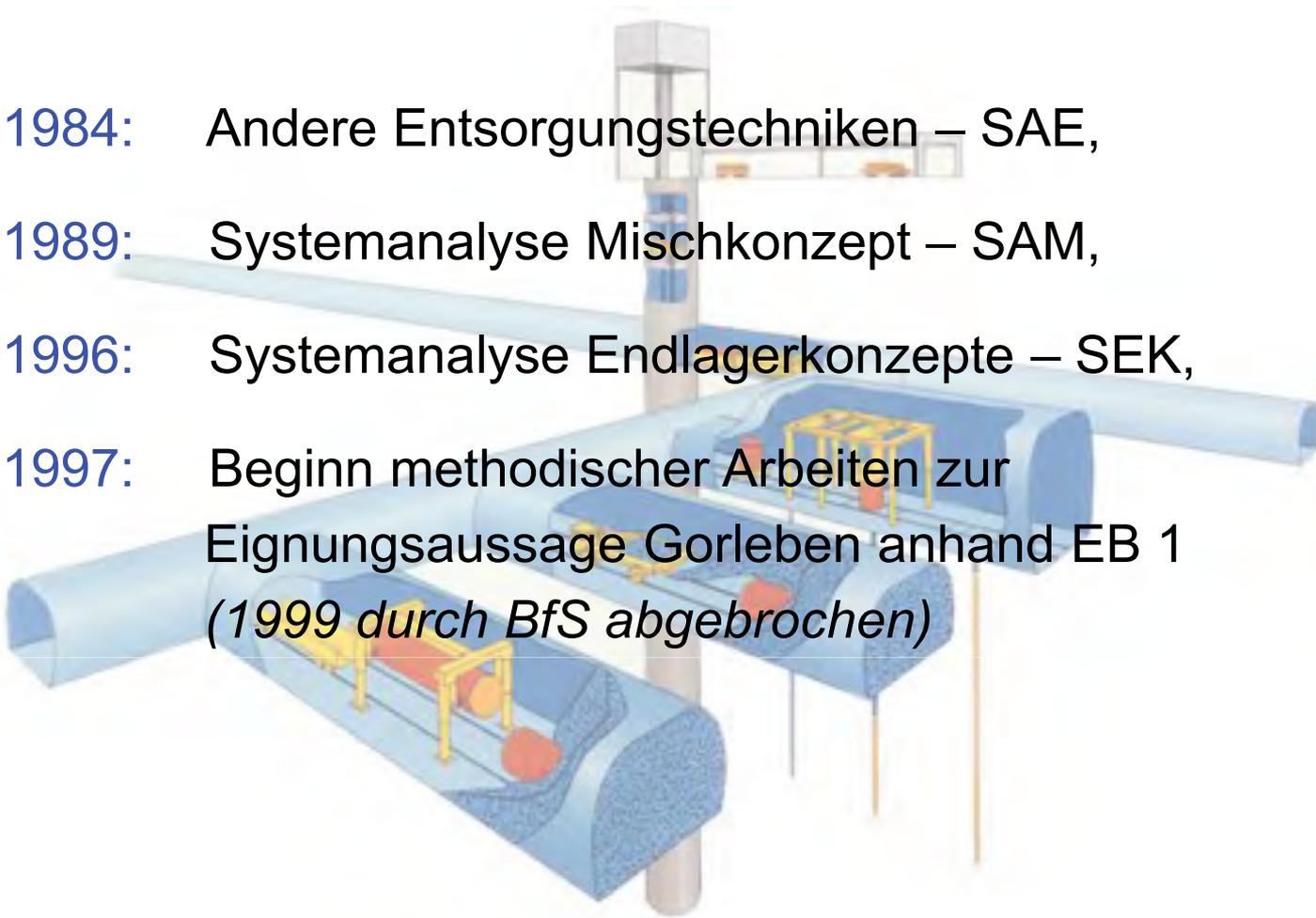
- Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, (BGR), Hannover
- Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig
- DBE TECHNOLOGY GmbH, Peine

Laufzeit: Oktober 2005 - März 2010;

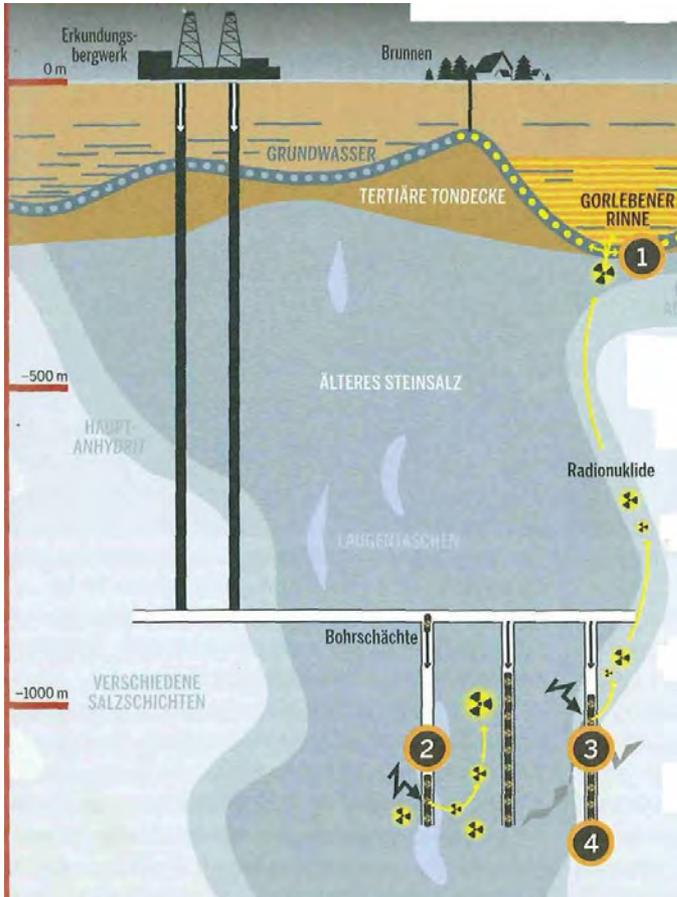
Gefördert durch den Projektträger Karlsruhe des BMWi

== Bisherige System- / Sicherheitsanalysen ==

- 1984: Andere Entsorgungstechniken – SAE,
- 1989: Systemanalyse Mischkonzept – SAM,
- 1996: Systemanalyse Endlagerkonzepte – SEK,
- 1997: Beginn methodischer Arbeiten zur Eignungsaussage Gorleben anhand EB 1
(1999 durch BfS abgebrochen)



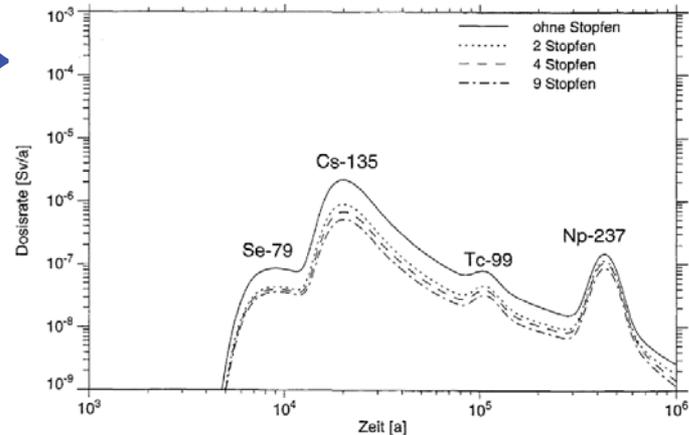
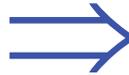
Bisherige Sicherheitsnachweise



Stilisiertes Anhydritszenario

(Quelle: Petermann)

- Nur Bewertung hypothetischer Freisetzung
- Kein systematischer Nachweis des sicheren Einschlusses,
- Keine Unterscheidung ungestörte und gestörte Entwicklung



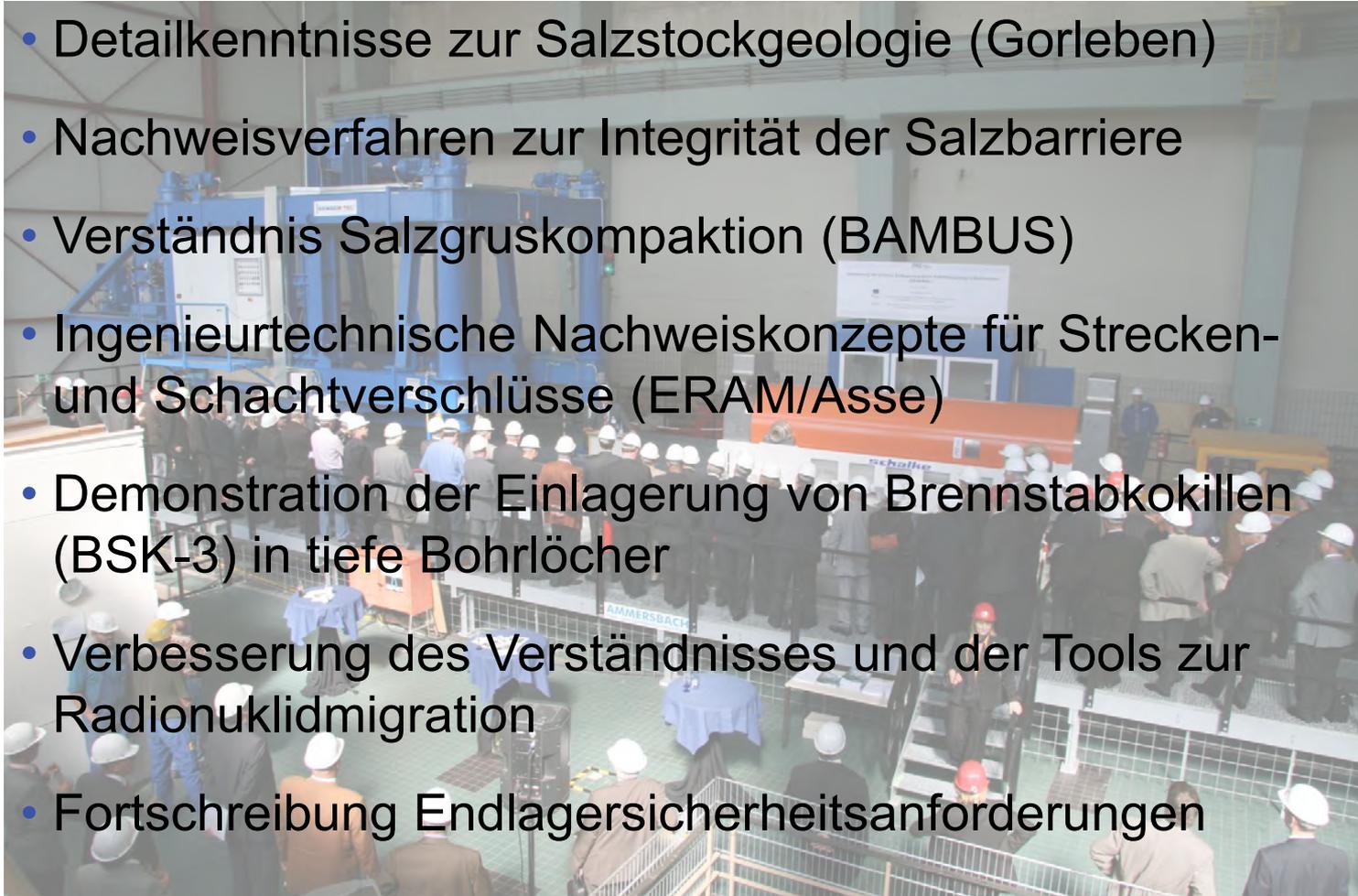
Dosisberechnungen

(Quelle: GRS)



Wichtige Fortschritte

- Detailkenntnisse zur Salzstockgeologie (Gorleben)
- Nachweisverfahren zur Integrität der Salzbarriere
- Verständnis Salzgruskompaktion (BAMBUS)
- Ingenieurtechnische Nachweiskonzepte für Strecken- und Schachtverschlüsse (ERAM/Asse)
- Demonstration der Einlagerung von Brennstabkokillen (BSK-3) in tiefe Bohrlöcher
- Verbesserung des Verständnisses und der Tools zur Radionuklidmigration
- Fortschreibung Endlagersicherheitsanforderungen



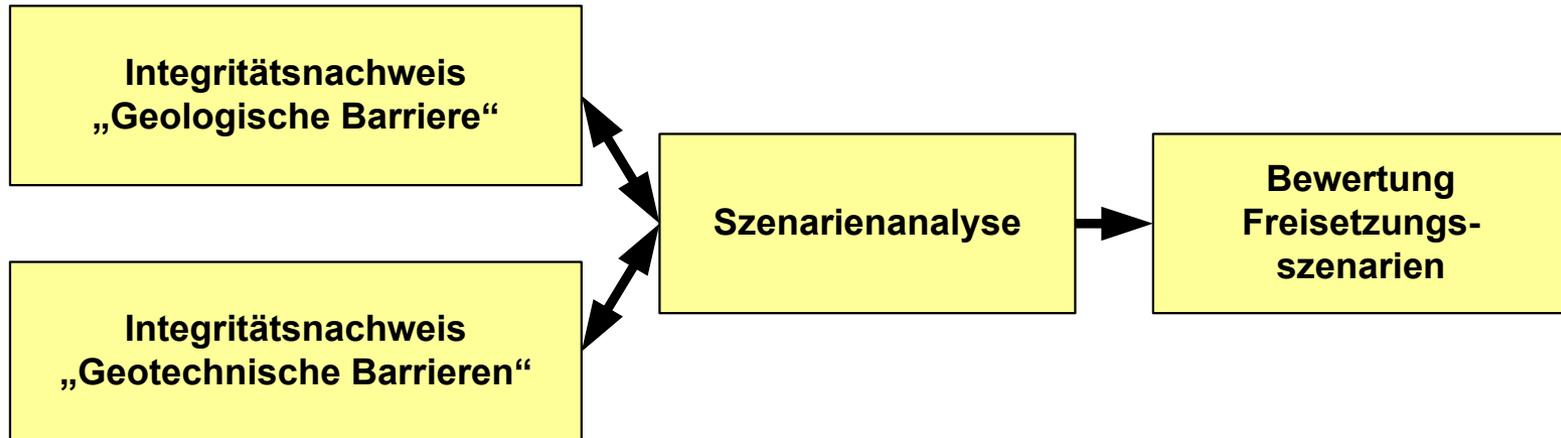
Neuer methodischer Ansatz

**Nachweis
„Sicherer Einschluss“**

Primär

**Bewertung
von Freisetzungen**

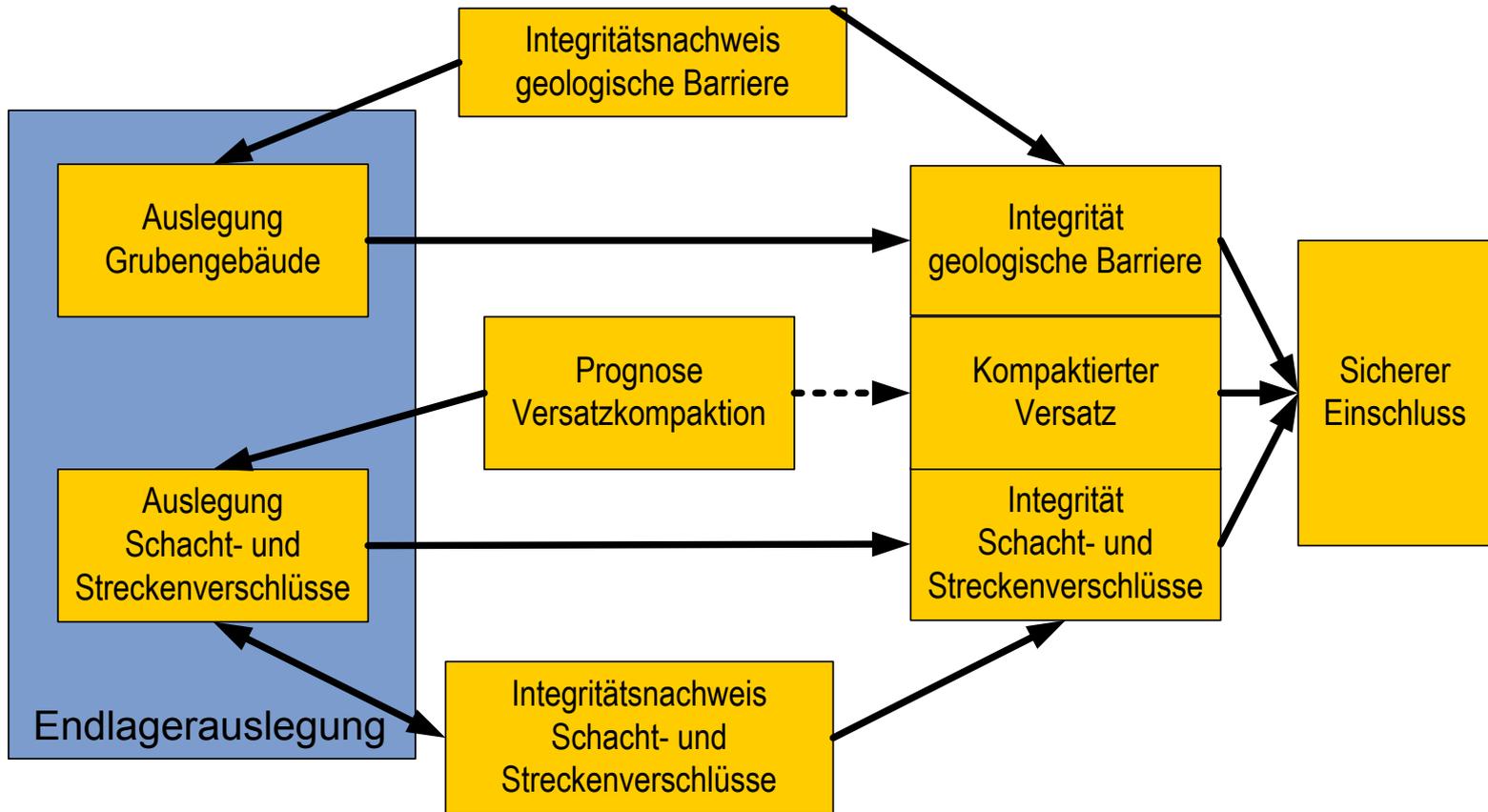
Komplementär



Ungestörte Entwicklung

Gestörte Entwicklung

Konzept „Sicherer Einschluss“

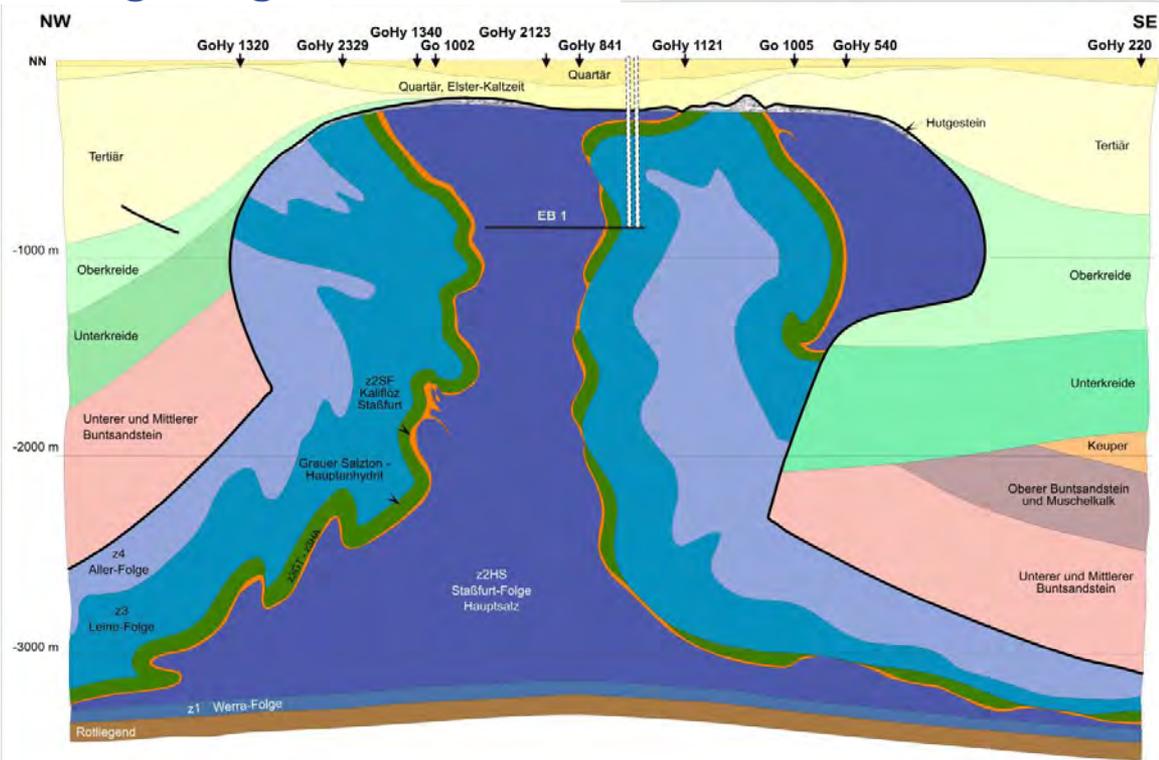


Referenzkonzept

- Geologie:* Verfügbarer Wissensstand zu
eignungshöffigen Salzstandorten in
Norddeutschland (Gorleben)
➤ Geologisches Referenzmodell
- Abfallspezifikation:* HAW + BE
(incl. Forschungsreaktoren) lt. Entwurf
zum nationalen Entsorgungsplan
➤ Ausstiegsszenario
- Endlagerkonzept:* Weiterentwicklung “Aktualisierung des
Konzeptes Endlager Gorleben” (1998)
+ Bohrlochlagerung BSK-3
+ Geotechnische Barrieren
- Keine LILW

Integritätsnachweis geologischer Barriere

Standortmodell: Vertikalschnitt



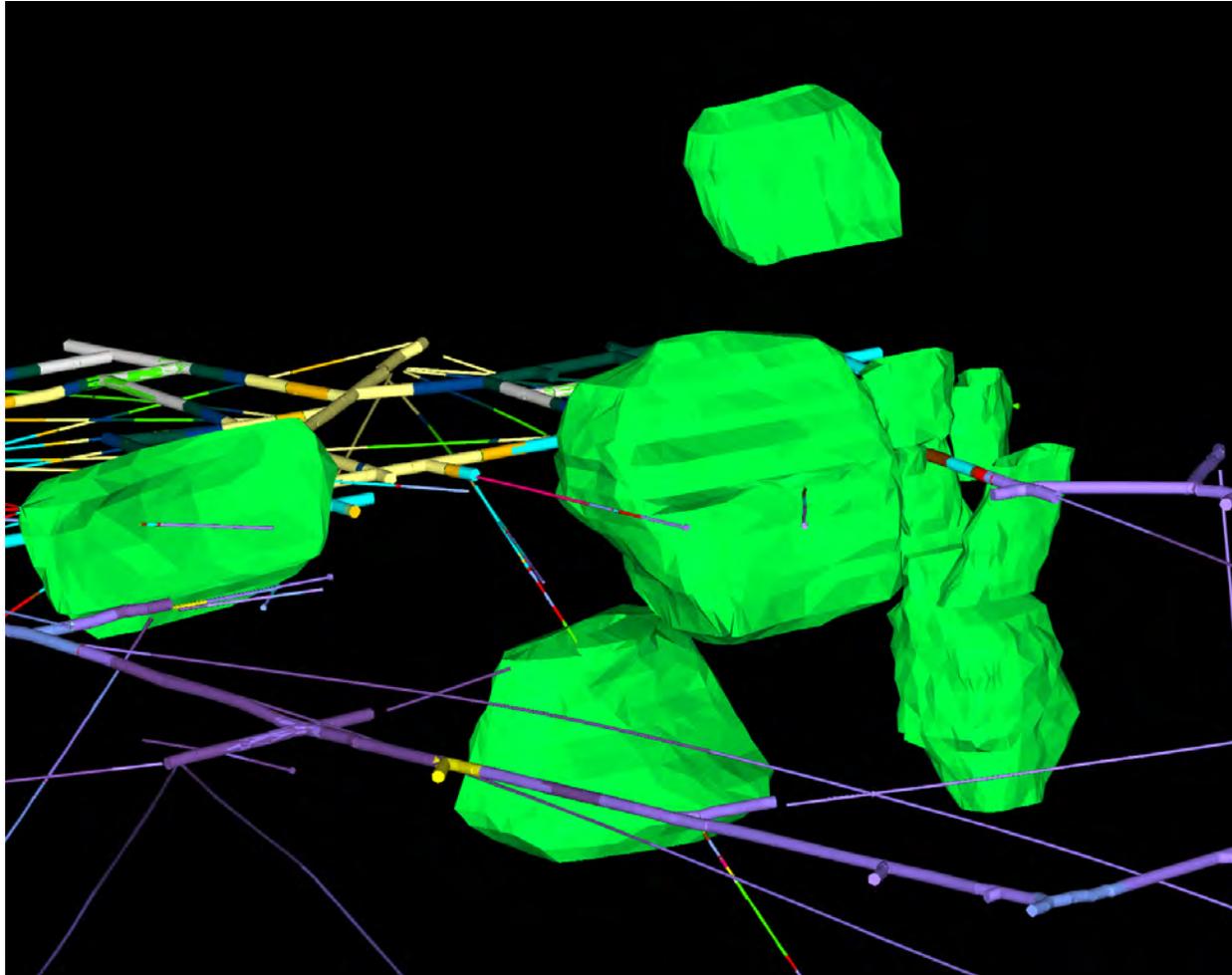
Features:

- Ausreichende Homogenbereiche im z2
- Hauptsalz nahezu frei von Lösungsvorkommen
- Langfristig geringe Subrosionsraten
- Salzstockaufstieg nahezu abgeschlossen
- Hauptanhydrit in isolierte Schollen zerbrochen

↳ **Geologische Integrität der Hauptbarriere**

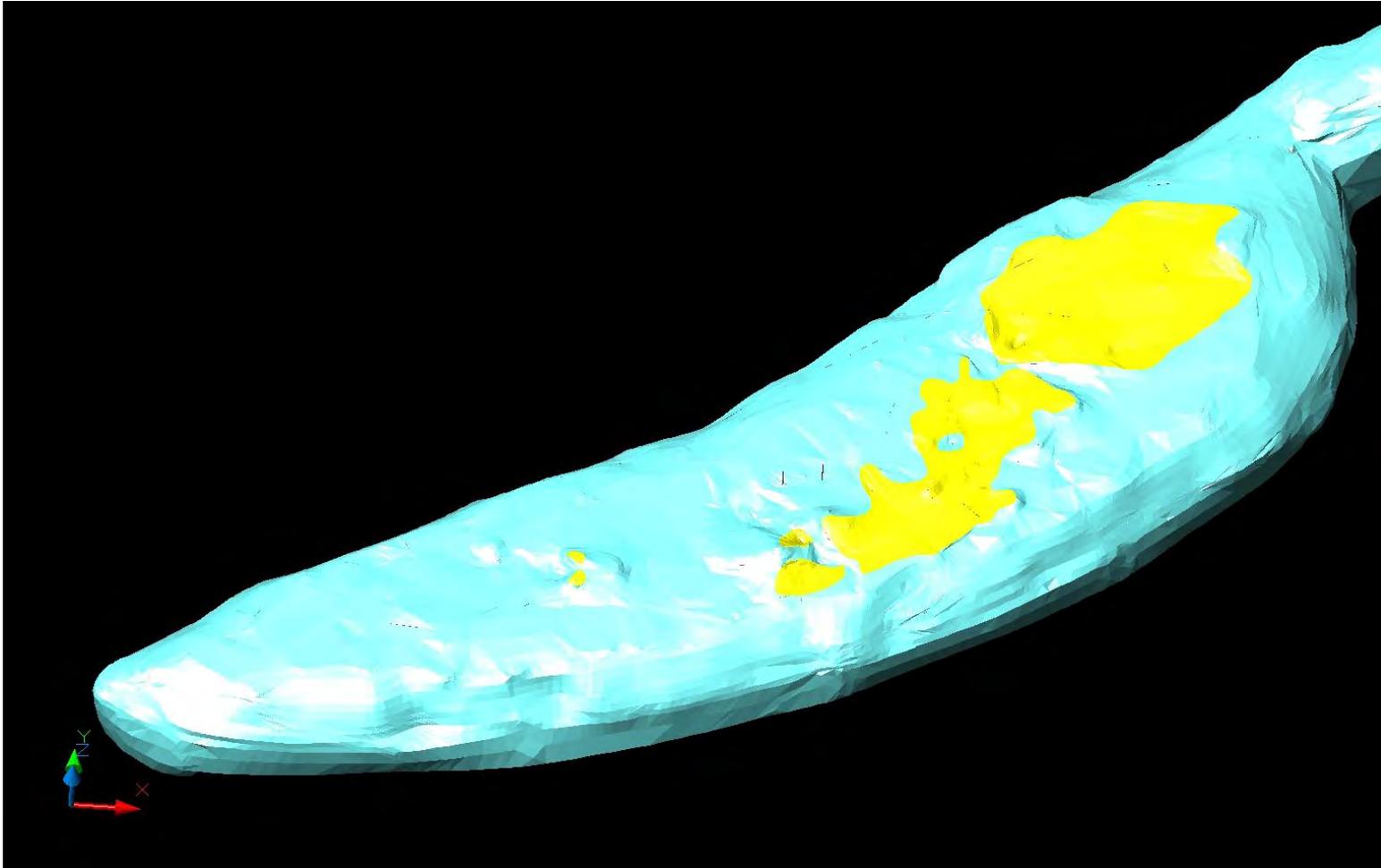
Integritätsnachweis geologischer Barriere

Zerblockung Hauptanhydrit



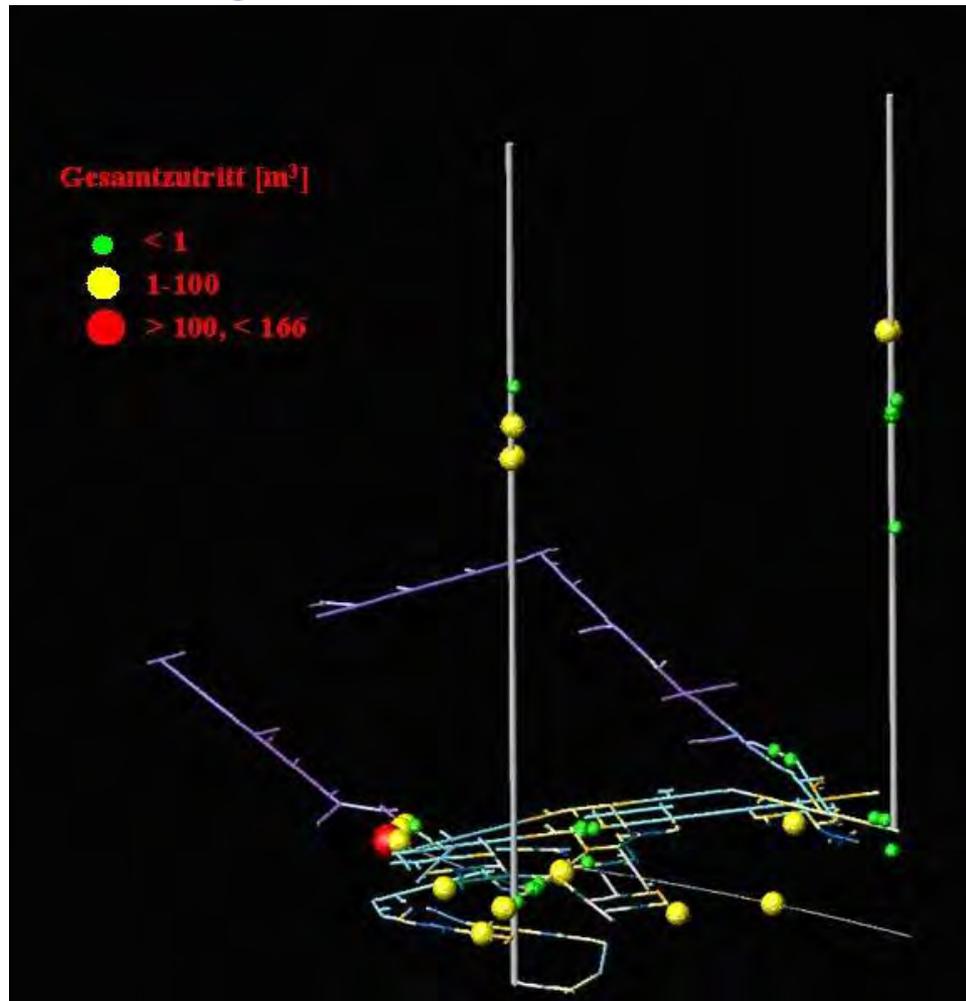
Integritätsnachweis geologischer Barriere

3D-Modell Salzstock Gorleben



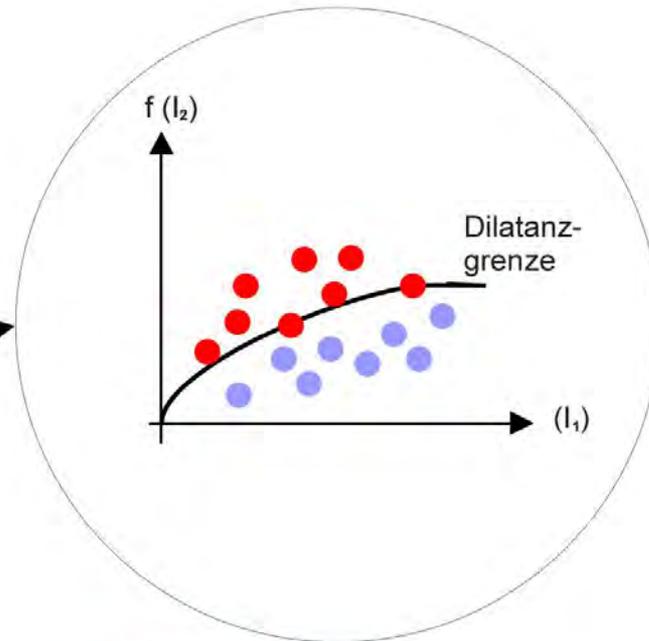
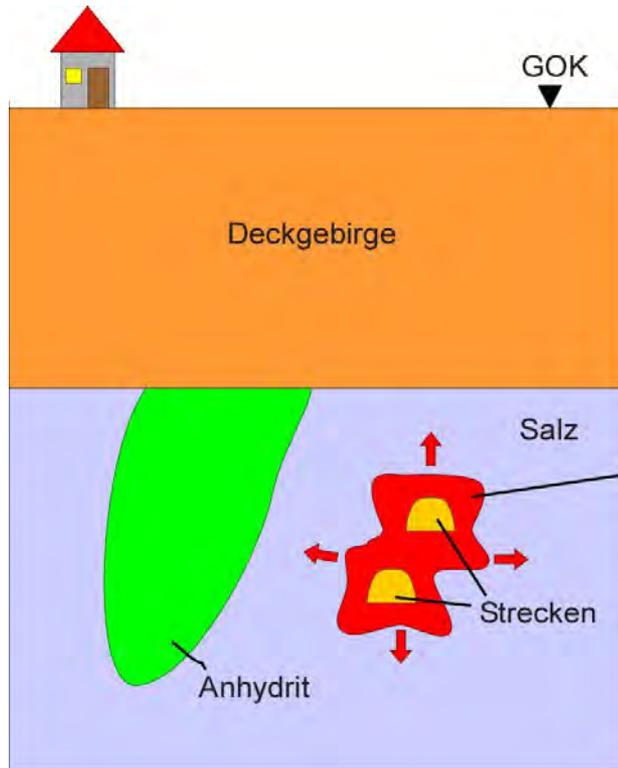
Integritätsnachweis geologischer Barriere

Übersicht zu Lösungsvorkommen



Integritätsnachweis geologischer Barriere

Dilatanz-Kriterium



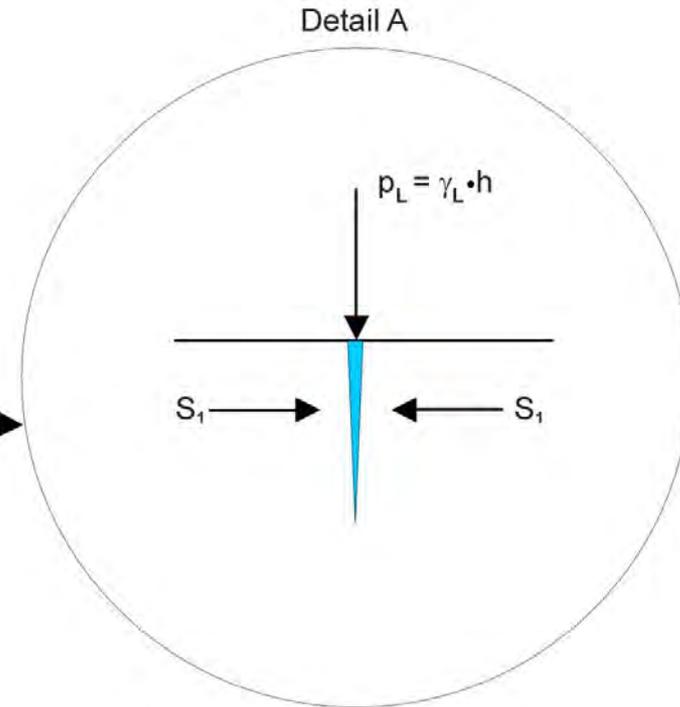
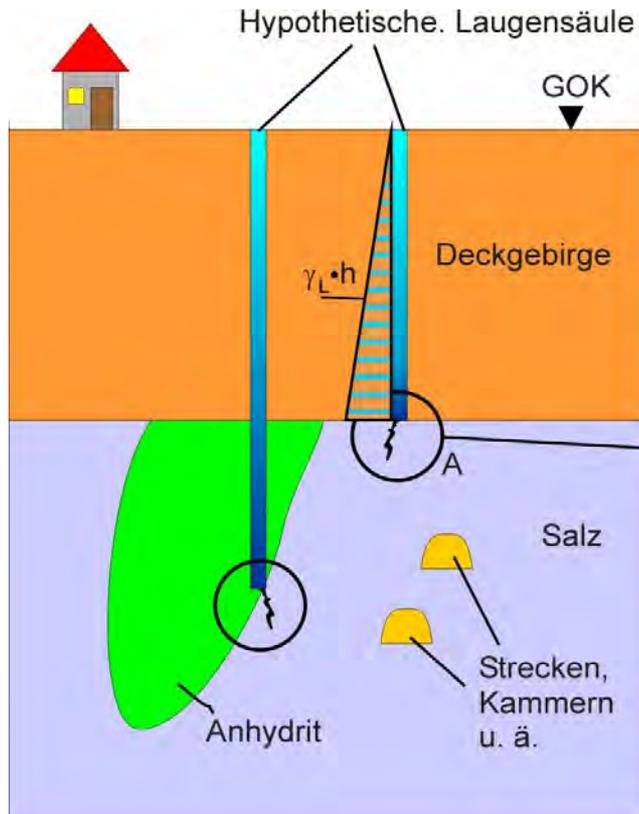
● Dilatante Bereiche

● "Integre" Bereiche

(Quelle: BGR)

Integritätsnachweis geologischer Barriere

Hydrofrac-Kriterium



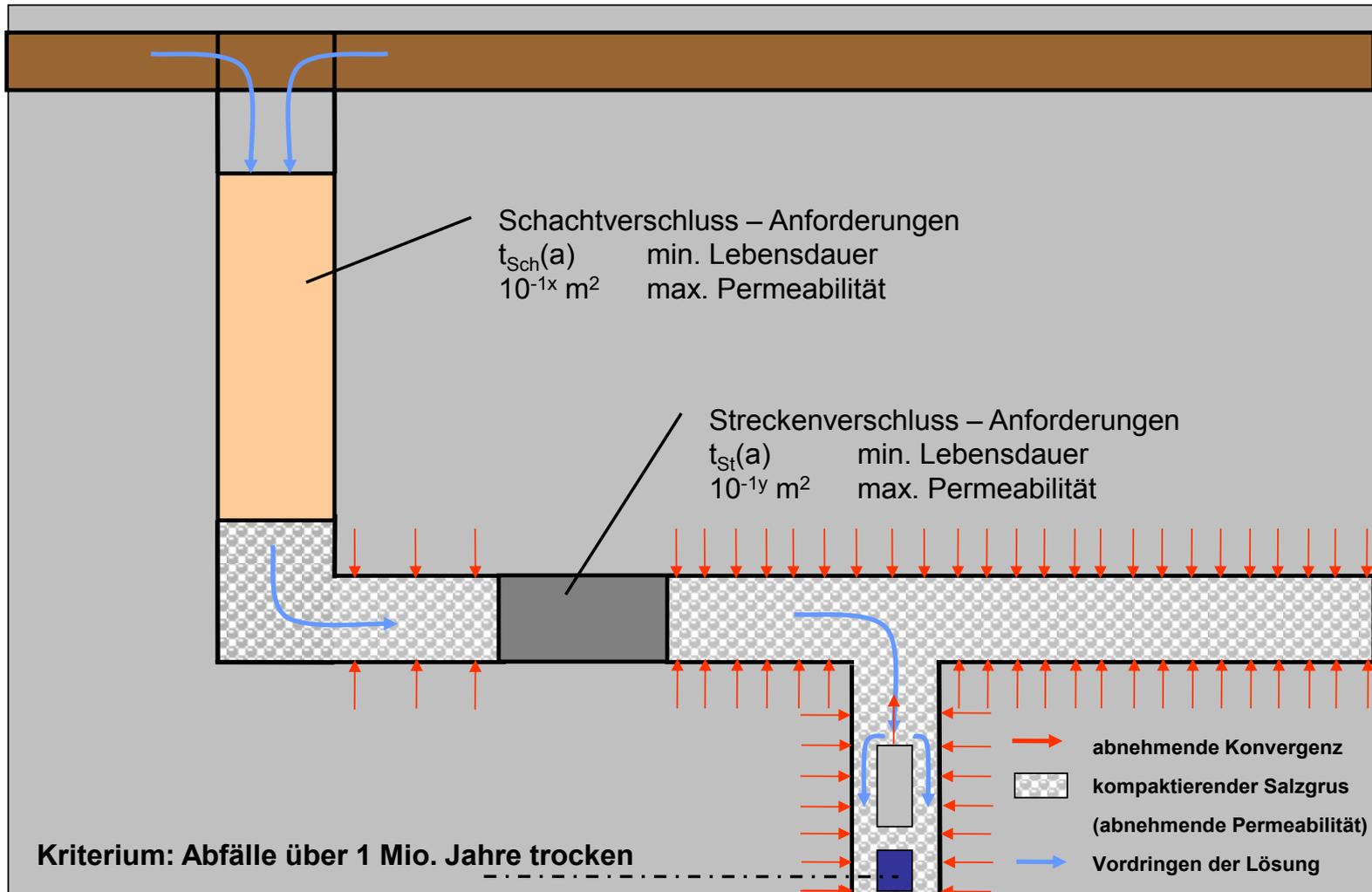
p_L = Laugendruck

S_1 = min. Hauptspannung

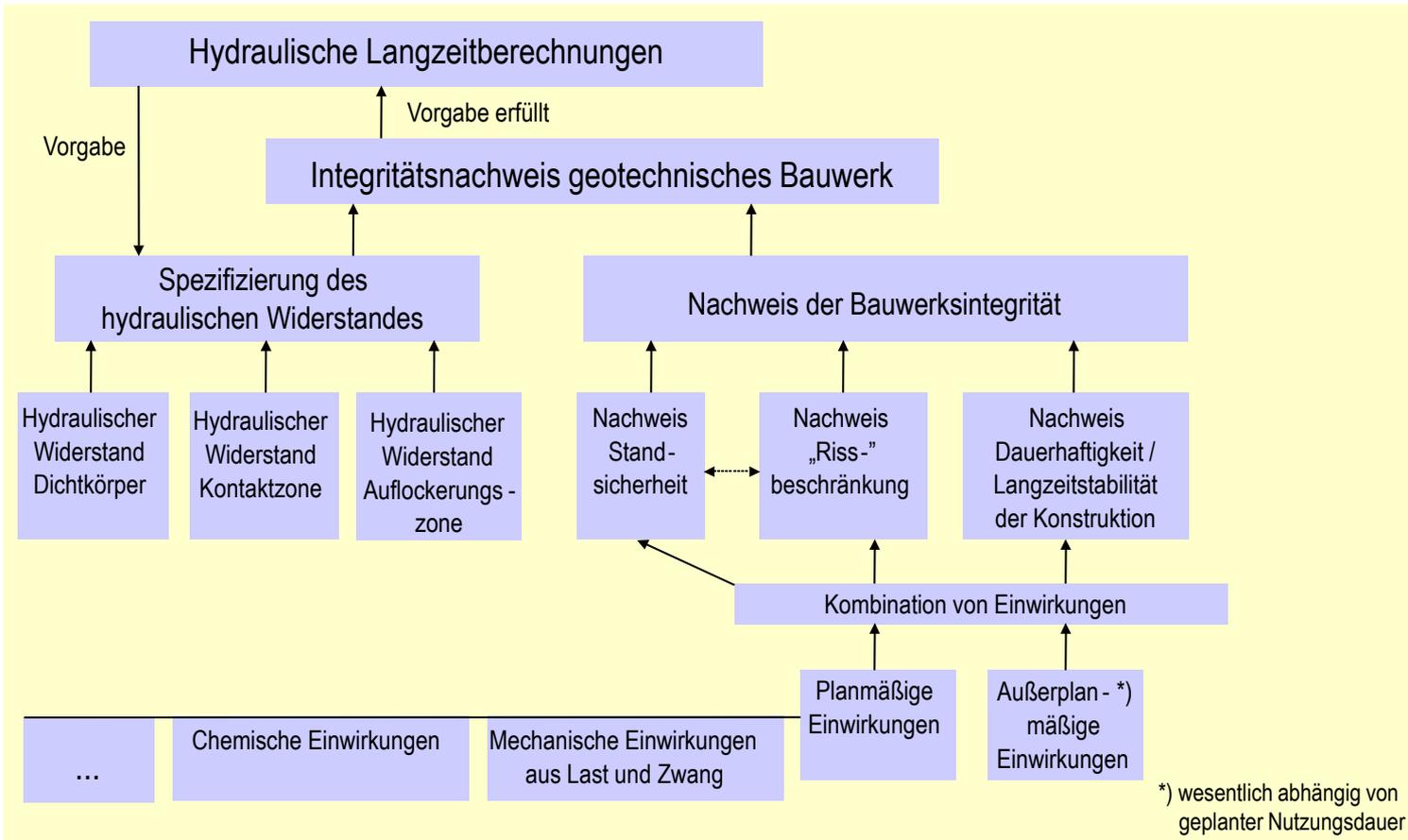
(Quelle: BGR)

Integritätsnachweis geotechnischer Barrieren

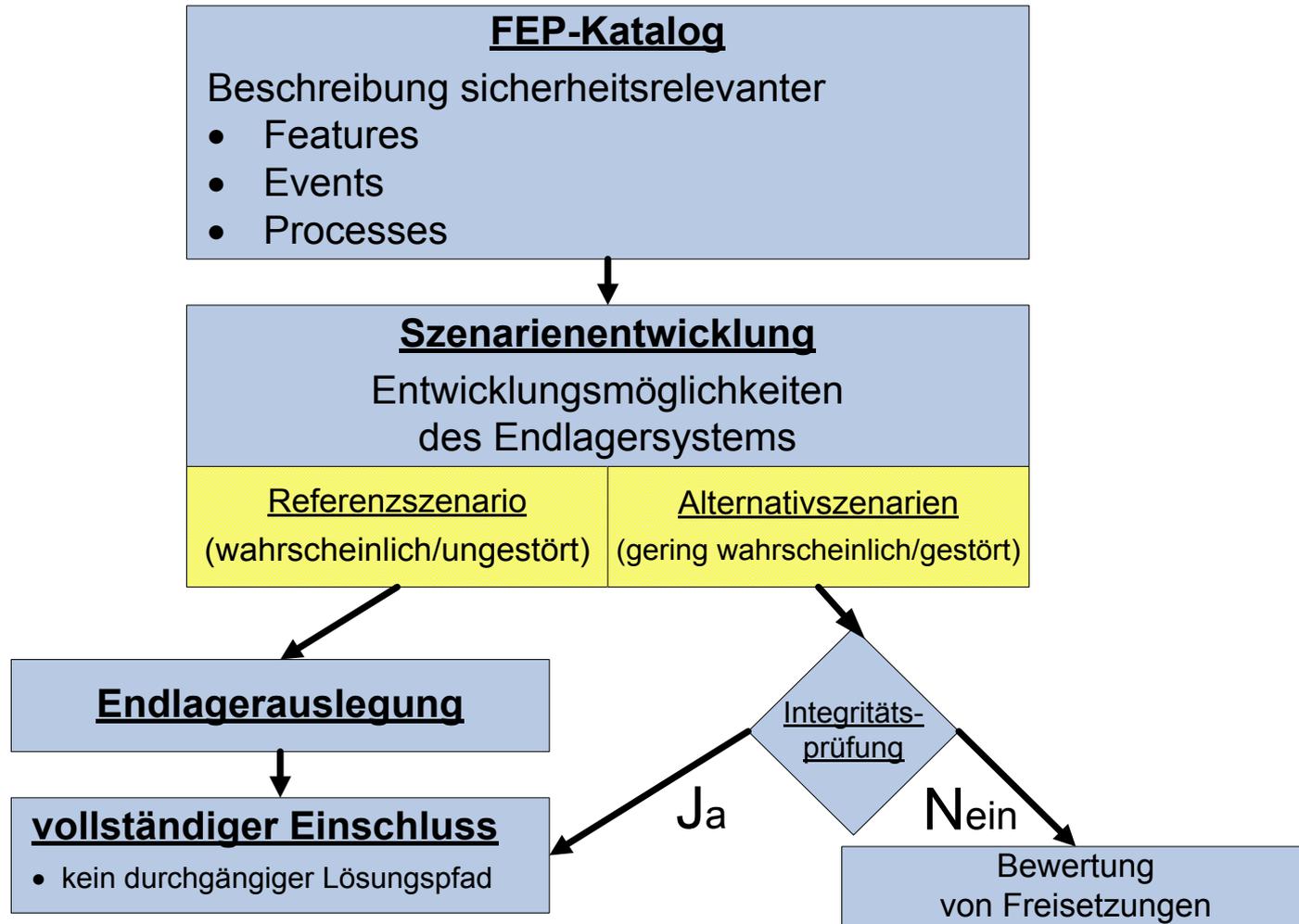
Ableitung der Auslegungsanforderungen



Integritätsnachweis geotechnischer Barrieren



Szenarienanalyse



== FEP-Katalog für Szenarientwicklung ==

- Strukturierte Beschreibung von 112 FEPs im Hinblick auf systematische Szenarientwicklung:
 - Beeinträchtigung Wirksamkeit einschlusswirksamer Barrieren
 - Kausale Verknüpfung
 - Klassifizierung nach Wahrscheinlichkeitsklassen
 - Wirksamkeit in Teilen des Nachweiszeitraumes und Endlagersystems
- Externer Review
(Prof. Röhlig; Dr. Apel, Dr. Kienzler, Prof. Lux, Prof. Odoj)
- Revision der FEP-Beschreibungen
- Erstellung einer FEP-Datenbank

Isibel 0.97.52 - (Build 390) | lommerzheim@dbeus7.isibel

Abfragen: sortiert nach fepnr

REP-Nr.: 1.1.12.001 NEA-Nr.: 1.1.12 Titel: Unplanmäßige Ereignisse in der Betriebsphase Datum: 09.02.2010

Kurzbeschreibung:
Dieses FEP umfasst unvorhergesehene Ereignisse in der Betriebsphase, die Auswirkungen auf die Barriereigenschaften des Wirtsgesteins haben können.

Bedingte Eintrittswahrscheinlichkeit:
 wahrscheinlich nicht zu betrachten
 wenig wahrscheinlich Randbedingung

Einwirkung auf die Funktion einschlusswirksamer Barrieren:
 direkt nicht zutreffend
 indirekt

Status: Event

Direkte Einwirkung auf die Funktion folgender einschlusswirksamer Barrieren: Keine

Begründungen:
Die Eintrittswahrscheinlichkeit unplanmäßiger Ereignisse in der Betriebsphase ist aufgrund technischer Vorsorgemaßnahmen (Auslegung des technischen Equipments, Qualitätssicherung, betriebliche Regelungen etc.) wenig wahrscheinlich. Im Genehmigungsverfahren ist im Zuge einer Störfallanalyse nachzuweisen, dass derartige Ereignisse keine negativen Auswirkungen auf die Funktion einschlusswirksamer Barrieren haben. Das FEP ist daher bei der Handhabung in allen vier Teilsystemen nicht zu berücksichtigen.

Algemeine Informationen | Sachlage | Auswirkungen | Direkte Abhängigkeiten | Handhabung | Literatur / Fragen | Revision

Algemeine Informationen und Beispiele:
Unplanmäßige Ereignisse in der Betriebsphase wie Schachtfälle und Unfälle bei der Einlagerung in Strecken und Bohrböhrern sind zwar auf die Betriebsphase beschränkt, allerdings können die Auswirkungen einen Einfluss auf die Nachbetriebsphase haben und müssen ggf. berücksichtigt werden.
Im Rahmen einer Störfallanalyse für das geplante Endlager Konrad konnte gezeigt werden, dass durch die entsprechende Auslegung der Schachtförderanlage die Ereignisse
- Absturz der Abfallgebinde bei der Beschickung des Förderkorbes,
- Absturz von Abfallgebänden bei der Förderung nach unten Tage,
- Absturz schwerer Lasten auf Abfallgebinde im Förderkorb, und
- thermische Einwirkungen auf Abfallgebinde infolge anlageninternen Brand
vermieden werden können, so dass sie nur noch der Störfallklasse 2 (INES) zugeordnet werden müssen. Die Auslegungsmaßnahmen umfassen u.a.:
- Verriegelungen,
- Achtschifförderanlage,
- Arretierung des Platteauwagens, und
- Auslegung der Bremsen.
Ein Absturz des Korbes ist dem Restrisiko zuzuordnen (BIS 2002).
Brände unter Tage im Bereich des Schachtes / Füllortes werden als Vollbrand eines LKW berücksichtigt.
Ein Brand im Schacht oder Füllort kann infolge der thermischen Expansion des Wirtsgesteins in der erwärmten Schachtwand die Spannungsverhältnisse auch in größerer Entfernung vom Schacht verändern. Wenn dabei Spannungen oberhalb der Dilatanzgrenze auftreten, kann die Integrität des Wirtsgesteins verletzt werden. Im Bereich der beim Verschluss des Endlagers einzubauenden Schachtdichtung könnte dann die Möglichkeit für eine Umströmung der Schachtdichtung durch aufgelockerte Wirtsgesteinspartien bestehen, sofern die Integrität nicht wieder hergestellt wird. Das Ausmaß der Integritätsbeeinträchtigung wird als gering eingeschätzt, da die Auswirkungen nur lokal begrenzt sind.
Bei der Einlagerung der Gähinde sind keine weiteren Störfälle zu betrachten, weil keine Hub- und Transportprozesse durchgeführt werden, die in den

Normal count: 112 skill: 4

- **Referenzszenario**

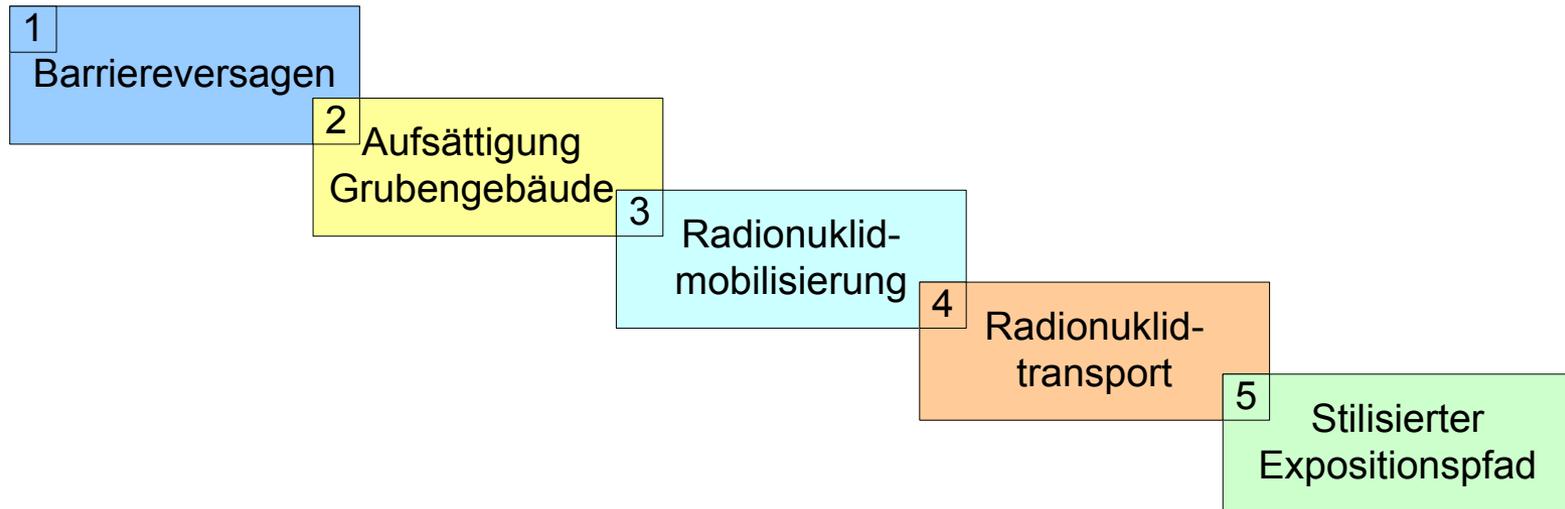
- systematisch abgeleitet aus FEP-Beschreibungen
- beschreibt abdeckend hinsichtlich Einwirkungen auf einschlusswirksame Barrieren möglichst große Gesamtheit wahrscheinlicher Entwicklungen
- Grundlage für Endlagerauslegung
- Basis für Identifikation von ...

- **Alternativszenarien**

- Ausgangspunkt integritätsverletzende FEPs
- Bewertung der Wahrscheinlichkeit und möglicher Konsequenzen

Bewertung von Freisetzungsszenarien

- Bewertung des Instrumentariums anhand stilisierter (angenommener) Szenarien



Indikatoren zum Nachweis des sicheren Einschlusses

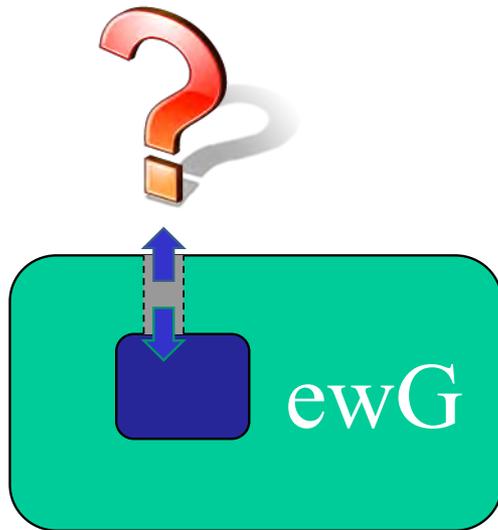
Was soll bewertet werden?

- Ausbildung eines durchgängigen Lösungspfades ?
- Lösungszutritt (Transportprozesse)
 - **Quantitativ-qualitative Bewertung der Transportprozesse**
- Auswirkungen der Radionuklidfreisetzung
 - **Radiologischer Geringfügigkeitsindex**

gestuftes Verfahren



Schritt 1: Bewertung der Transportprozesse



Folgende Angaben werden gemacht:

- Durchgängiger Lösungspfad [j/n]
- ausgepresste Lösungsmenge nach 10^6 a [m^3]
- Beginn der Auspressung [a]
- **Beginn der Radionuklidmobilisierung [a]**
- **Beginn der Freisetzung aus den ELB [a]**
- Ende des Konvergenzprozesses [a]
- **Dominierender Transportprozess**

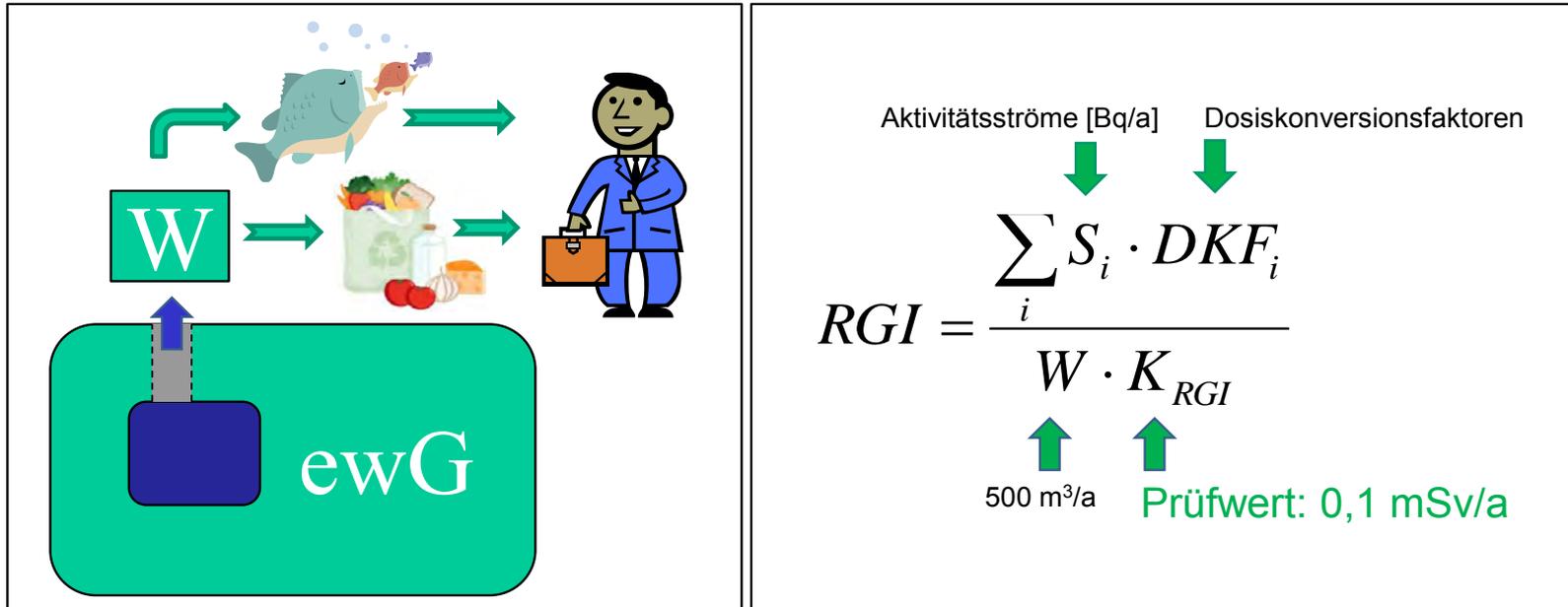


sehr aussagekräftig, flexibel einsetzbar (Abstufungen sicherer Einschluss)



keine vollständige Quantifizierung möglich

Schritt 2: Radiologischer Geringfügigkeitsindex (RGI)



Sicherheitsrelevanz, "Vergleich" mit Strahlenexposition Biosphäre möglich

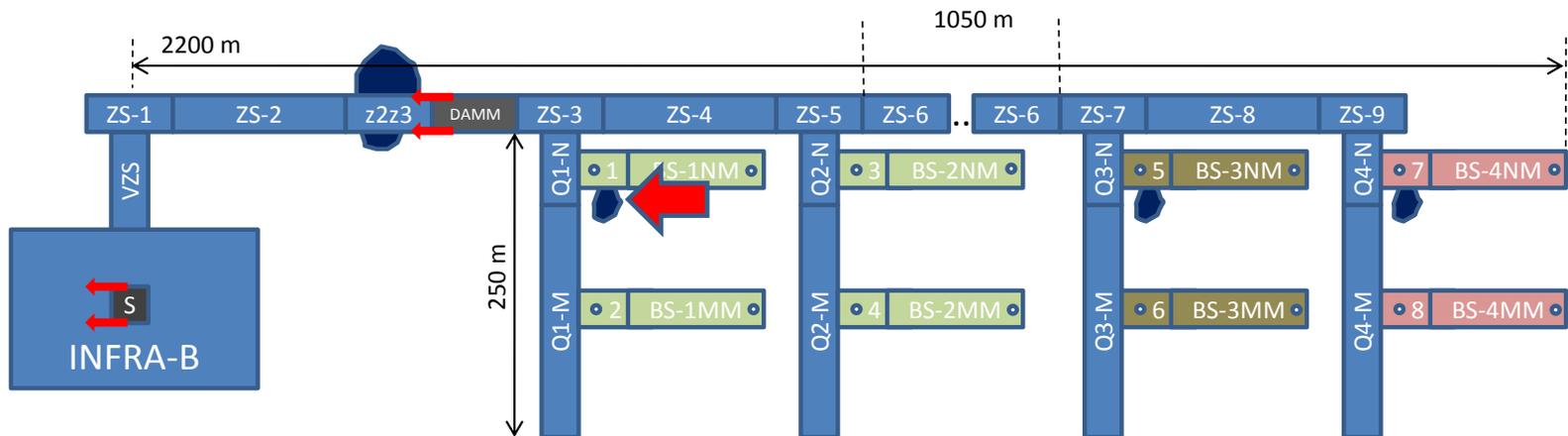


stilisiertes Szenario

Rechenfall: „Lösungseinschluss in einem Bohrloch mit BSK 3“

1. Bewertung der Transportprozesse:

- Am Schacht ausgepresste Lösungsmenge nach 10^6 a: **60 m³**
- Beginn der Auspressung: **1.075 a**
- Beginn der Radionuklidmobilisierung: **sofort (BBSK-1NW)**
- Beginn der Freisetzung aus den Einlagerungsbereichen: **sofort (BBSK-1NW)**
-  Zeile des Konvergenzprozesses: **n. e. (BBSK-1NW)**



Radionuklidstrom [Bq/a]

Schacht

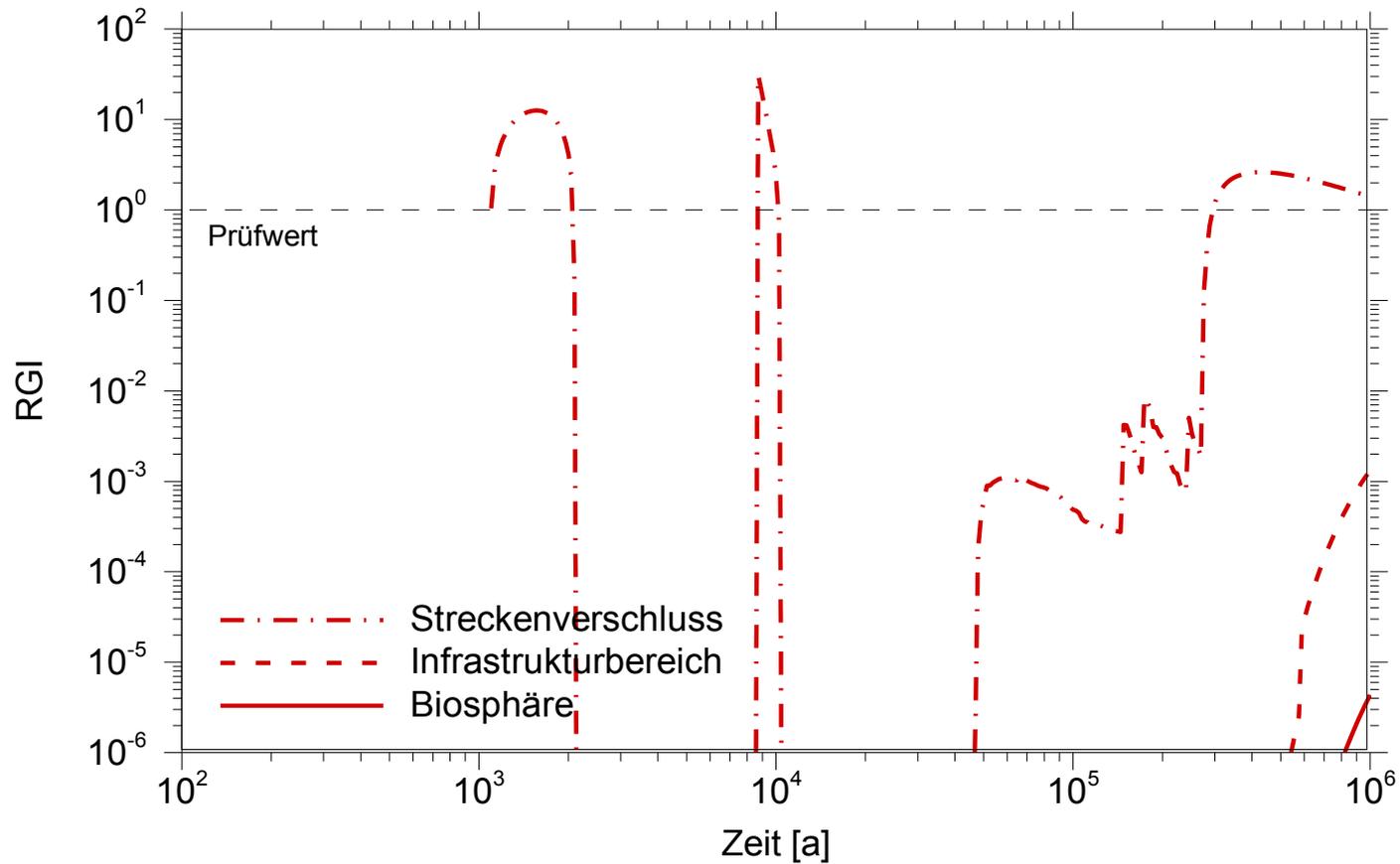
Einlagerungsbereich

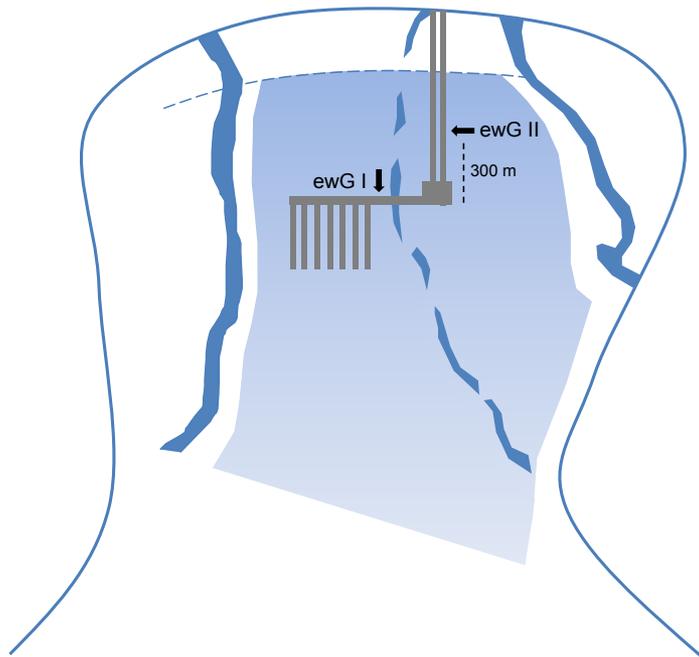
Einlagerungsbereich BSK

Einlagerungsbereich CSD-V

Rechenfall: „Lösungseinschluss in einem Bohrloch mit BSK 3“

Radiologischer Geringfügigkeitsindex (RGI)





ewG I:

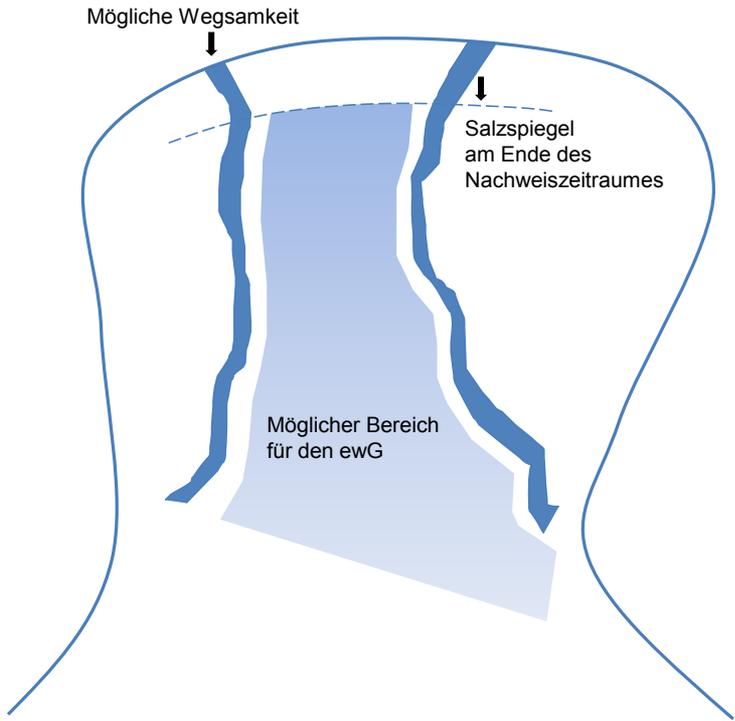
- 👍 beschränkt sich auf Hauptsalz
- 👎 verletzt Prüfwert in Entwicklungen ohne relevante Freisetzung

nt verletzt
 ifwand bei
 ; der Barrieren

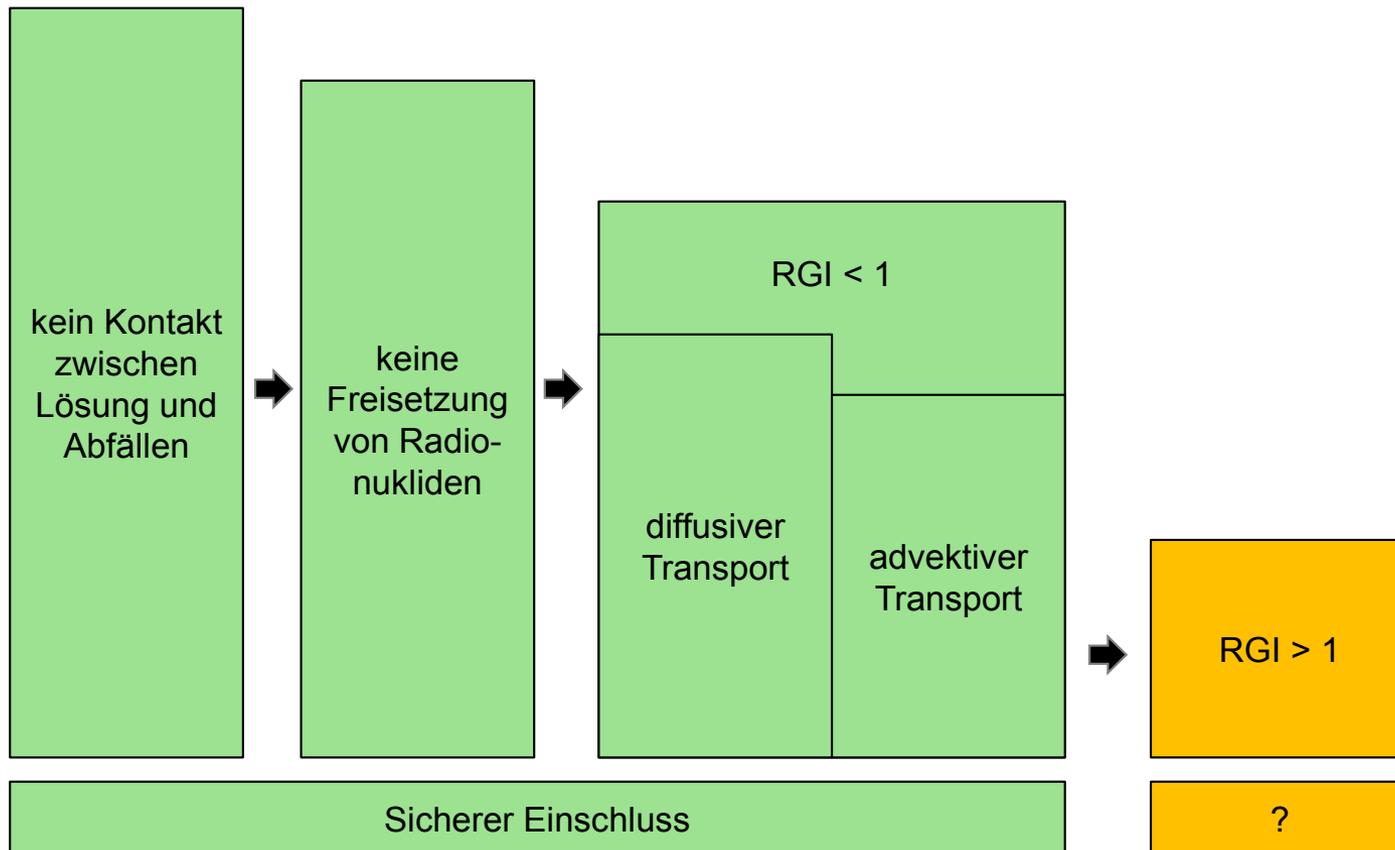


→ Gebirgsbereich
Hauptstock,
Nachweiszeitraum
der Erosion
ann.

→ Gebirgsbereich sind die
1) Abstand zu
Wegsamkeiten zu
entstehen können,



=



„Synonym“ für Informationsdefizite

- endliche (begrenzte) Genauigkeit von Informationen, Abbildern und Modellen
- Grenzen der Prognostizierbarkeit
- natürliche Streuungen

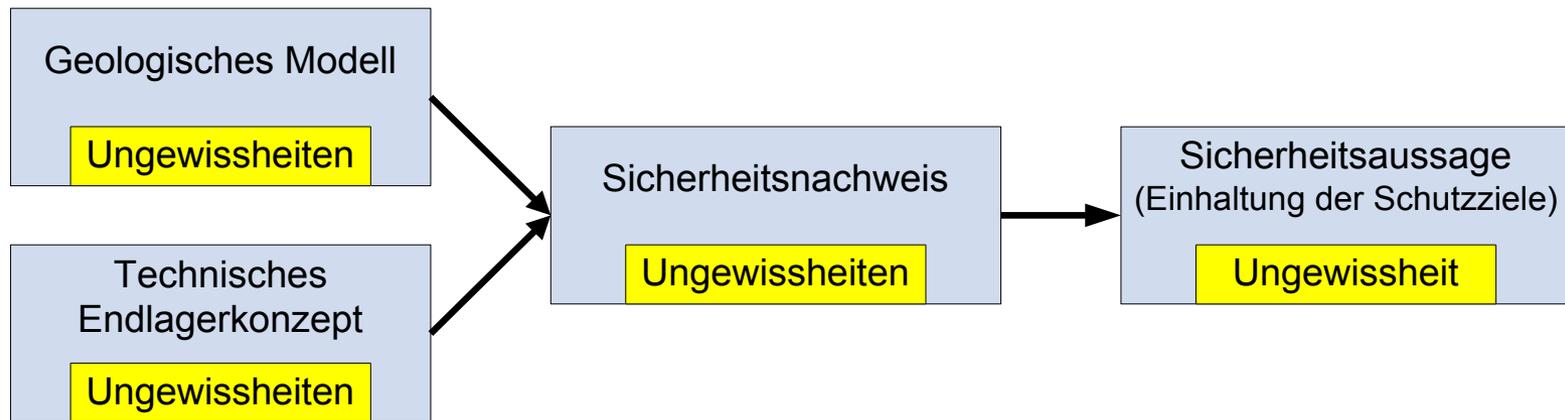
Nach erkenntnistheoretischem Typ

- aleatorisch (oder stochastisch): „natürlich zufällig“
- epistemisch (oder subjektiv): „fehlende Kenntnis“

Nach Art der Quelle

- Daten- und Parameter-Ungewissheiten
- Modell-Ungewissheiten
- Szenarien-Ungewissheiten (Prognose-Ungewissheiten)

Auswirkungen der Ungewissheiten



===== Erforderliche Zuverlässigkeit der Sicherheitsaussage =====

- **Schadensvorsorge nach Stand von Wissenschaft und Technik**
(§ 7 (2)3. AtG)

Keine Berücksichtigung von Ungewissheiten jenseits des Standes von Wissenschaft und Technik (Grenze der praktischen Vernunft)

- **Risiken für zukünftige Generation dürfen heute akzeptierte Risiken nicht übersteigen**

Akzeptierte Risiken für Leib und Leben (p_r)

Bauwesen (Eurocode): $< 10^{-6}/a \sim 10^{-4}/\text{Lebenszeit}$

StrlSchV: $< 0,3 \text{ mSv/a} \sim 2 \cdot 10^{-3}/\text{Lebenszeit}$

- **Sicherheitsanforderungen:** $< 10^{-4}/\text{Lebenszeit}$ (p_{rsz})

- **Gesamtes von einem Endlager ausgehendes Risiko**

(Wahrscheinlichkeit einen Gesundheitsschaden zu erleiden)

$$p_r \approx p_{rgs} + p_f$$

p_f ...Wahrscheinlichkeit einer falschen Sicherheitsauassung

p_{rgs} ...Wahrscheinlichkeit eines Gesundheitsschadens bei eingehaltenem Schutzziel

⇒ **Wegen Sinnfälligkeit: $p_f < p_{rsz}!$; $p_f \ll p_{rsz}$ vernachlässigbar**

Verfahren zur Behandlung von Ungewissheiten

Methoden	Beispiel	Mängel	Konsequenz
Expert Judgement	Geologische Modellierung	Ungewissheit/ Zuverlässigkeit nicht quantifizierbar	<ul style="list-style-type: none"> • konservative Modelle bis zur Grenze der praktischen Vernunft • ggf. in Fallunterscheidungen
Szenarienanalyse	Prognose möglicher Endlagerentwicklungen	Sehr komplex, Eintrittswahrscheinlichkeiten schwer prognostizierbar	Szenarien mit Eintrittswahrscheinlichkeiten $p_s \ll p_{rsz}$ nicht zu betrachten
Methodik der Teilsicherheitsbeiwerte	Funktionsnachweis geotechnischer Barrieren	Übertragbarkeit empirischer Ansätze sowie auf lange Zeiträume nicht belegt	<ul style="list-style-type: none"> • bei ausreichend geringer Versagenswahrscheinlichkeit p_v und bei $p_v^2 \ll p_{rsz}$, ist Doppelversagen nicht zu betrachten • bei Einfachversagen ggf. eingeschränkte Betrachtung anderer Ungewissheiten möglich
Deterministische Parametervariation	Konsequenzenanalyse	Äußerst aufwendig, kaum vollständig möglich	<ul style="list-style-type: none"> • Parameterkonstellationen mit Eintrittswahrscheinlichkeiten $p_{pk} \ll p_{rsz}$ können entfallen
Monte Carlo-Verfahren	Konsequenzenanalyse	<ul style="list-style-type: none"> • Parameterverteilungen oft nicht begründbar • sehr aufwendig, nur geringe Grundgesamtheiten realisierbar 	<ul style="list-style-type: none"> • statistische Unsicherheit $p_{su} < p_{rsz}$ kaum erreichbar • möglichst Kombination mit anderen Ansätzen, zum Erreichen hinreichender Zuverlässigkeit.

Fehlen eines einheitlichen zuverlässigkeitsbasierten Ansatzes !

Methodik der Teilsicherheitsbeiwerte

- Übertragbarkeit auf lange Zeiträume
- Übertragbarkeit empirisch gewonnener Ansätze

Probabilistische (Monte Carlo) Methoden

- Gewährleistung statistischer Sicherheit^{Pr}
 - durch hinreichend große Grundgesamtheit
 - durch geeignete Verteilungsfestlegung
 - durch „Konzentration“ auf signifikante Randbereiche (Übergang zu höheren Konsequenzen bei kleinen Eintrittswahrscheinlichkeiten)

Annahme: Radiologische, technische und bergbauliche Sicherheit im bestimmungsgemäßen und ungestörten Betrieb kann durch geeignete technisch-organisatorische Maßnahmen gewährleistet werden

⇒ **Konzentration auf potenzielle Schwachstellen und Störfälle**

- Systematische Identifikation potenzieller Störfälle und Schwachstellen
- Verbalargumentative Bewertung deren Beherrschbarkeit und möglicher Konsequenzen

Nicht-radiologische Schutzziele

Grundwasserschutz

- Keine bloße Übernahme der Vorgehensweise beim radiologischen Langzeitsicherheitsnachweis, jedoch
- Nutzung wesentlicher Elemente des radiologischen Langzeitsicherheitsnachweises, insbesondere zum Nachweis des sicheren Einschlusses

Schutz der Tagesoberfläche

- *Tagesbrüche* - dank geringen Durchbauungsgrades, großer Teufenlage und vollständiger Verfüllung ausschließbar
- *Relevante Schiefstellungen* ($> 1/600$ pro 100 Jahre) – treten dank großräumiger Hebungen und Senkungen in der thermischen Phase nicht auf

DBE TECHNOLOGY GmbH



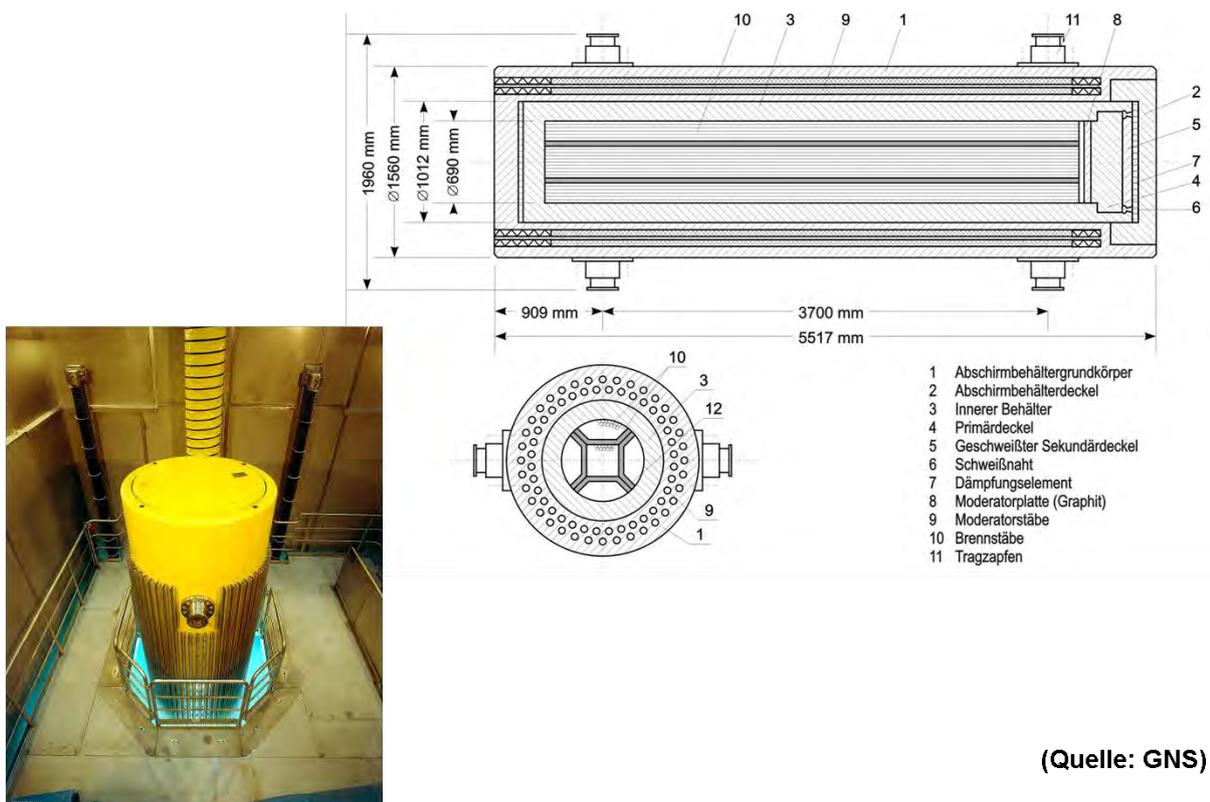
**Vielen Dank
für Ihre Aufmerksamkeit.**

Resultate der Arbeiten zum Endlagerkonzept Direkte Endlagerung abgebrannter Brennstäbe in Brennstabkokillen (BSK)

W. Filbert, J. Wehrmann, W. Bollingerfehr
DBE TECHNOLOGY GmbH
Peine

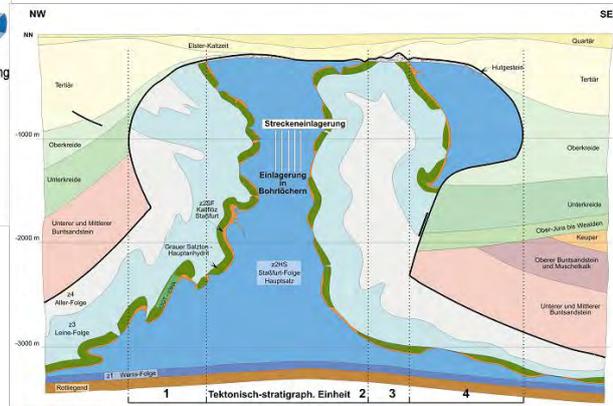
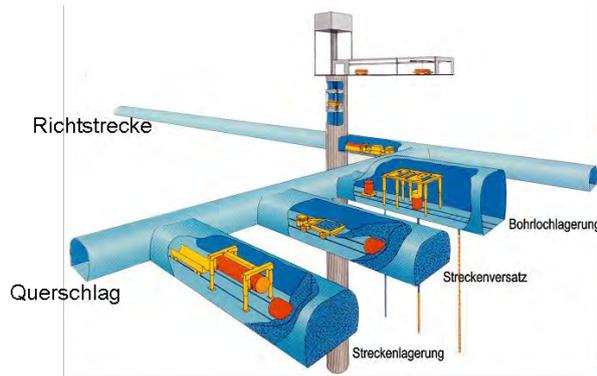
1 Einleitung

Das Referenzkonzept zur Direkten Endlagerung ausgedienter, gezogener Brennstäbe ist die Streckenlagerung von POLLUX-Behältern /1/ (Abbildung 1) auf der Einlagerungssohle eines Endlagerbergwerkes im Wirtsgestein Salz. Das Referenzkonzept umfasst auch die Bohrlochlagerung von HAW- und CSD-C-Kokillen in tiefen Bohrlochern von der Einlagerungssohle aus (Abbildung 2). Mit dem Ziel einer Optimierung der Einlagerungsprozesse prüft GNS (Gesellschaft für Nuklear-Service mbH) ein Einlagerungskonzept für Brennstabkokillen (BSK 3) /2/. In Tabelle 1 sind die Daten zum POLLUX-Behälter, zu den Gebinden für die Bohrlochlagerung und zum aus heutiger Sicht zugrunde zu legenden Mengengerüst zusammengestellt.



(Quelle: GNS)

Abbildung 1: POLLUX 10-Streckenlagerung



Referenzkonzept für HAW-Endlager in Salz:

- Tiefe geologische Endlagerung (Teufe: 870 m)
- Einlagerung von HAW-Kokillen in Bohrlochern
- Einlagerung von POLLUX-Behältern in Strecken
- Versatzmaterial: Salzgrus

Projektion des Referenzkonzeptes in vereinfacht dargestellte Geologie des Salzstockes Gorleben

Abbildung 2: Referenzendlagerkonzept

Gebindetyp	POLLUX-10-Behälter	BSK 3	HAW-Kokille	CSD-C CSD-B-Kokille ^{*)}
Masse [t]	≤ 65	ca. 5,2	ca. 0,5	≤ 0,85
t_{SM} (Tonne Schwermetall)	ca. 5,4	ca. 1,6	./.	./.
ca.-Anzahl Gebinde	2.000	6.800	3.600	4.700
Durchmesser/Höhe [mm]	1.560/5.517	430/4.980 Kopfbereich Ø 440	430/1.338	≤ 440/≤ 1.345

- ^{*)} CSD-C = Colis Standard des Dechets Compactes (hochdruckkompaktierte Strukturteile etc.)
 CSD-B = Colis Standard des Dechets Boues (Kokillen für verglaste Schlämme und Betriebsabfälle)

Tabelle 1: Mengengerüst und Daten zu den Endlagergebinden

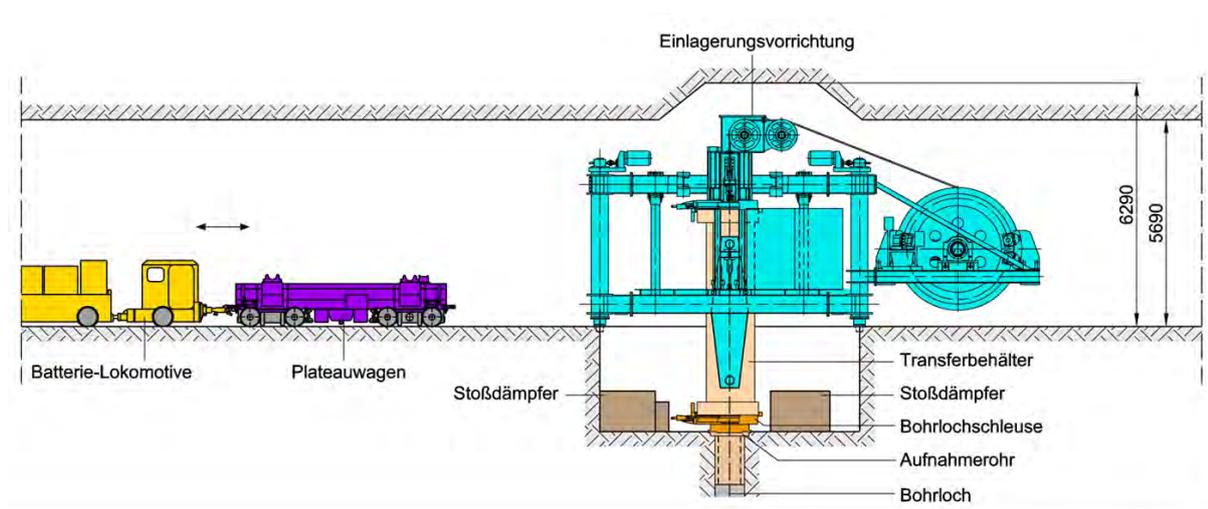
Mit dem Konzept der Bohrlochlagerung von Brennstabkokillen sollen folgende Ziele erreicht werden:

- Verbesserte Steuerung des Wärmeeintrages in das Wirtsgestein durch gezielte Anordnung von wärmeentwickelnden Abfällen (Brennstabkokille und HAW-Kokille) und vernachlässigbar wärmeentwickelnden Abfällen (CSD-C- und CSD-B-Kokille).

- Verringerung des Endlagerflächenbedarfs durch dreidimensionale Ausnutzung des Wirtsgesteins und dadurch Verringerung der zu erkundenden und aufzuschließenden Fläche im Endlager.
- Verringerung der Gasproblematik im Endlager durch Einsparung des Overpacks.
- Im Vergleich zur POLLUX-Einlagerung ein zeitlich schneller ablaufender Prozess bei der Brennstabkokille bis zum vollständigen Einschluss durch das aufkriechende Salz.
- Verwendung weitgehend einheitlicher Einlagerungstechnik für HAW- und CSD-C- und Brennstabkokillen sowie Reduzierung der Behältersystemvielfalt.

2 FuE-Vorhaben zur Entwicklung und Erprobung der BSK 3-Endlagerung

Im Rahmen des FuE-Vorhabens "Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöcher" wurde ein technisch machbares Konzept zur Endlagerung von Brennstabkokillen in vertikale Bohrlöcher entwickelt und erprobt (Abbildung 3). Unterstützt und finanziell gefördert wurde das Projekt einerseits vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) - vertreten durch den Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE) und von der EU-Kommission als Teil des Integrierten Projekts ESDRED (Engineering Studies and Demonstration of Repository Designs). Andererseits beteiligte sich die Industrie, vertreten durch die GNS, an diesem Demonstrationsvorhaben. Im Einzelnen wurden die technische Machbarkeit nachgewiesen, die Sicherheit in der Betriebsphase durch hinreichend viele Demonstrationsversuche über Tage überprüft und Ableitungen für die Sicherheit in der Nachbetriebsphase getroffen. Gleichzeitig wurde auch die grundsätzliche Genehmigungsfähigkeit dieses Bohrlochlagerungskonzeptes nachgewiesen.



Ausgewähltes Einlagerungssystem für BSK 3:
Semimobile Einlagerungsvorrichtung über dem Bohrloch

Abbildung 3: Einlagerungssystem

3 Versuchsstand und Versuchsprogramm

Der in den Abbildungen 4 und 5 dargestellte Versuchsstand wurde vom September 2008 bis Juni 2009 in einer ehemaligen Turbinenhalle eines Kraftwerkes betrieben.



Erprobung der Transport- und Einlagerungstechnik für Brennstabkokillen im Maßstab 1:1 (2008/2009)

Abbildung 4: Versuchsstand „Einlagerungssohle“

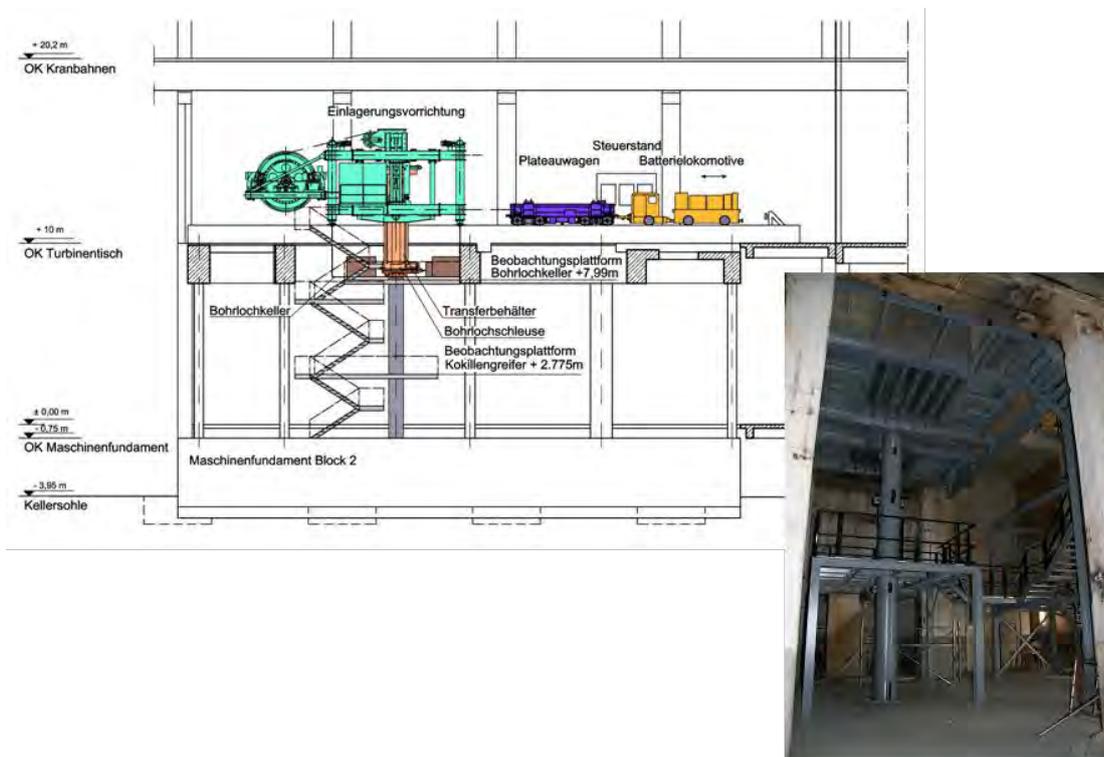


Abbildung 5: Versuchsstand (Vertikalschnitt und Foto von der Verrohrung)

Das Versuchsprogramm umfasste drei Schwerpunkte:

- Demonstrationsversuche mit einem BSK 3-Dummy und einem Triple-Pack (Overpack für drei inaktive HAW-Kokillen) (Abbildungen 6 und 7)
- Versuche zur Behebung von Betriebsstörungen und Simulationsversuche
- Versatzversuche zum Eignungstest eines entwickelten Versatzbehälters

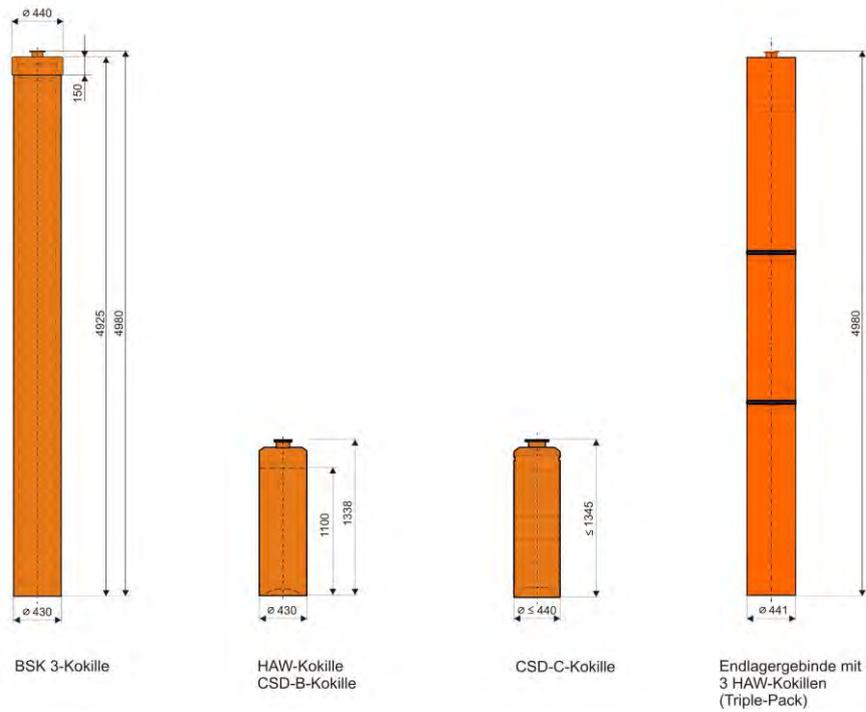


Abbildung 6: Abfallgebinde (Schemazeichnung)

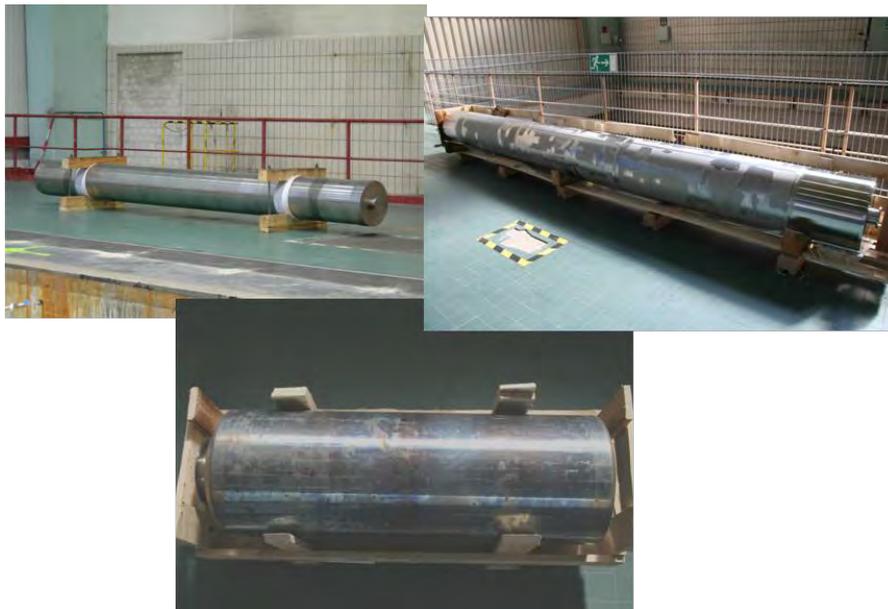


Abbildung 7: Fotos von BSK 3-Dummy, HAW-Kokille und Triple-Pack

4 Versuchsergebnisse

4.1 Demonstrationsversuche

Die BSK 3 wird am Endlagerstandort in einem Transferbehälter von der Konditionierungsanlage zum Einlagerungsort in das Endlager transportiert. Dort wird der Transferbehälter mit der Einlagerungsvorrichtung aufgenommen, in die Vertikale geschwenkt und auf einer Bohrlochsleuse – dem Bindeglied zum Einlagerungsbohrloch – abgesetzt. Aus dem Transferbehälter wird die BSK 3 mit einem patentierten, seilgeführten Greifer in das Bohrloch abgelassen. Im Versuchsstand wurde das Bohrloch, dessen Länge im Endlager voraussichtlich bis 300 m betragen wird, durch ein 10 m-Stahlrohr simuliert.

Im Versuchsstand wurden der Transport des Transferbehälters mit dem BSK 3-Dummy zum Einlagerungsort, die Übernahme der BSK 3-Dummy durch die Einlagerungsvorrichtung sowie das Einlagern des Gebindes in das Bohrloch simuliert/getestet. Der Nachweis der technischen Zuverlässigkeit des Einlagerungssystems insgesamt und der einzelnen Komponenten wurde mit der Durchführung von 1.000 Einlagerungszyklen erbracht. Anfänglich aufgetretene Störungen während der Versuche konnten auf Herstellungsfehler beim Bau der Einlagerungsvorrichtung zurückgeführt werden. Während der Versuche trat weder ein „zufälliger Ausfall“ noch ein zu behebender Auslegungsfehler auf.

In weiteren etwa 120 Einlagerungszyklen wurde zudem erstmalig der Nachweis der technischen Zuverlässigkeit desselben Systems für die im Referenzkonzept des Bundes vorgesehene Bohrlochlagerung von HAW-Kokillen erbracht. Verwendet wurde ein dem BSK 3-Dummy geometrisch annähernd identisches Overpack - ein sogenannter Triple-Pack -, in dem drei HAW-Kokillen-Dummies enthalten waren.

4.2 Versuche zur Behebung von Betriebsstörungen sowie Simulationsversuche

Folgende Versuche zur Behebung von Betriebsstörungen und Simulationen konnten erfolgreich durchgeführt werden:

- Wiederaufgleisen eines entgleisten beladenen Plateauwagens (Abbildung 8)
- Streckentransport der Einlagerungsvorrichtung auf dem Plateauwagen (Abbildung 9)
- Manuelles Schließen aller Schleusen im Falle einer mechanischen Betriebsstörung während des Einlagerns (Abbildung 10)
- Passgenaue Positionierung der Einlagerungsvorrichtung über dem Bohrloch
- Absetzen der BSK 3 auf Salzuntergrund und Öffnen des Greifers bei max. Schrägstellung (Abbildung 11)



Abbildung 8: Wiederaufgleisen beladener Plateauwagen



Abbildung 9: Streckentransport Einlagerungsvorrichtung



Abbildung 10: Notbetätigung Bohrlochschleuse

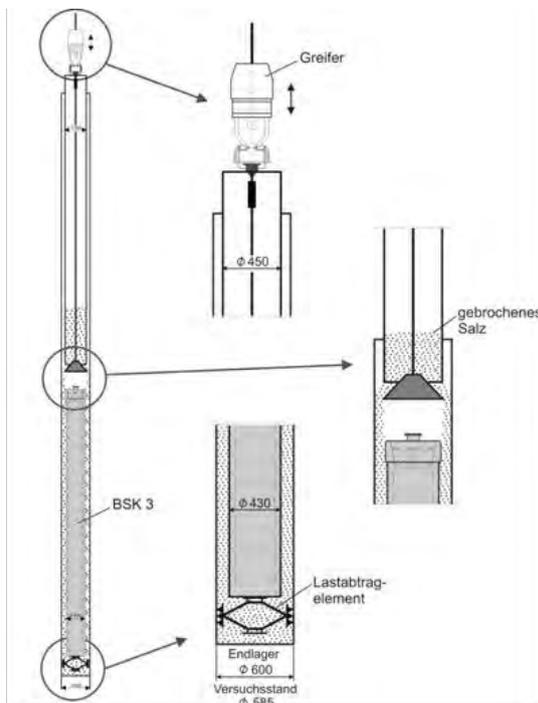


Abbildung 11: Absetzen der BSK 3 auf Salzuntergrund und Öffnen des Greifers bei max. Schrägstellung

4.3 Versatzversuche

Die Einlagerung von Brennstabkokillen und von HAW-Kokillen mit verglastem Abfällen in Bohrlochern erfordert aus radiologischen und thermischen Aspekten die Verfüllung des Resthohlraums mit einem Verfüllmaterial. Bei einem Endlager im Salz ist Salzgrus das zur Verfüllung vorgesehene Material. In einer Versuchsserie war zu erproben, ob die Verfüllung des Ringraumes um den ca. 5 m langen BSK 3-Dummy möglich ist.

Zur Erprobung des Versatzverfahrens wurde ein Prototyp eines Versatzbehälters entwickelt. Im Bohrloch wurde unter die eingelagerte BSK 3-Dummy ein mechanisches Stützelement eingebaut zur Verhinderung zusätzlicher Lasten aus der Gebindestapelung im Endlager. Es hat sich gezeigt, dass der Resthohlraum um die Kokille ebenso wie der im Bereich des Stützelementes verfüllt werden können. Eine Laugenzugabe zur Staubbindung beim Versetzen ist bei der Bohrlochlagerung nicht erforderlich, da keine Beeinträchtigung des Betriebspersonals besteht.



**Bohrlochverfüllung mit Salzgrus
(Versuchsschema)**



**Bohrlochverfüllung mit Salzgrus
(Foto: Versuchsstand)**

Abbildung 12: Zusätzliche Untersuchungen

5 Bewertung

Das Einlagerungssystem zur Bohrlochlagerung von BSK 3 erreichte mit der erfolgreichen Durchführung des vorgenannten Projektes den Stand der Technik. Damit wurde dieses System auf das gleiche Niveau hinsichtlich der Handhabungstechnik gehoben wie das ebenso erfolgreich erprobte Einlagerungssystem für POLLUX-Behälter bei der Streckenlagerung.

Die Bergbautauglichkeit sowie die mechanische, thermische und radiologische Auslegung der Einzelkomponenten wie auch des Gesamtsystems sind durch unabhängige Dritte (DMT, TÜV Süd) positiv beurteilt worden. Hinweise der Gutachter beschränkten sich auf die möglichen Auswirkungen von Salzstaubeinwirkungen, wie sie unter Tage zu erwarten sind. Diese sind für beide Teile des Referenzkonzeptes

- Streckenlagerung von POLLUX-Behältern und
- Bohrlochlagerung von HAW-Gebinden

noch zu untersuchen und durch Demonstrationsversuche zu belegen.

Literatur

- /1/ Aktualisierung des Konzepts "Endlager Gorleben", Abschlussbericht, 13.02.1998, BfS, unveröffentlicht
- /2/ H. Spilker: Status of the Development of Final Disposal Casks and Prospects in Germany, DISTEC '98, International Conference on Radioactive Waste Disposal, September 9-11, 1998, Hamburg

**Optimierung der
Direkten Endlagerung
durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern
- Abschluss des Projekts DENKMAL -**

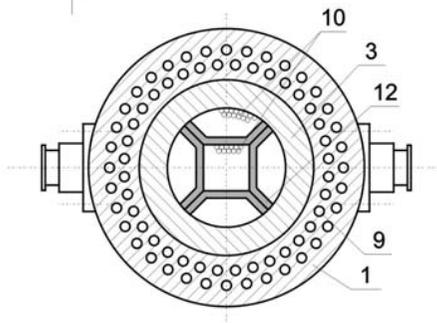
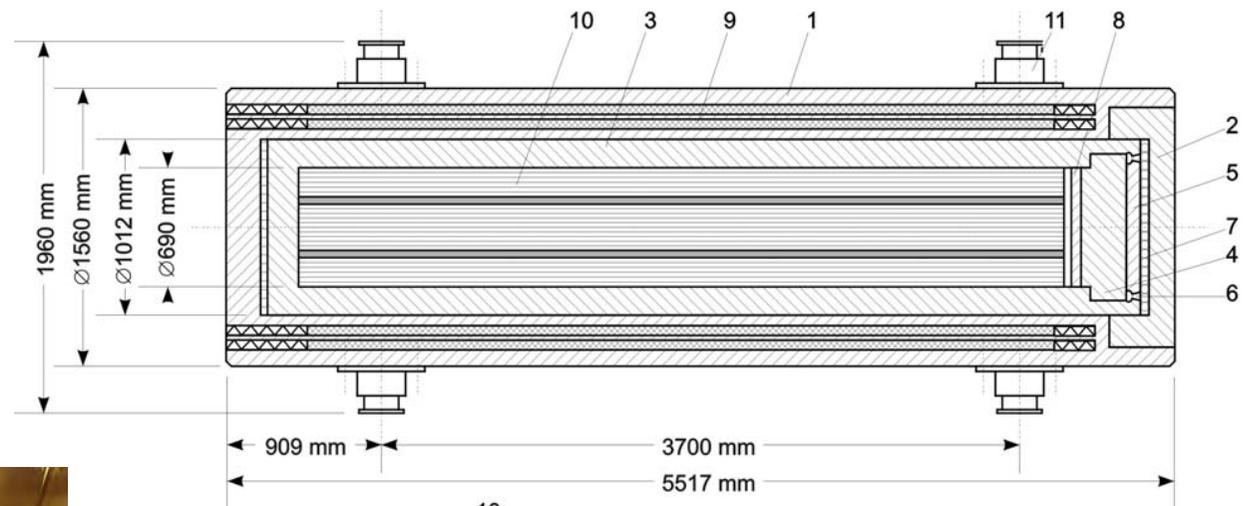
*Wolfgang Filbert
Wilhelm Bollingerfehr
Jobst Wehrmann*

DBE TECHNOLOGY GmbH
Peine

Gliederung

- Referenzkonzept
- Optimierungsansatz zur Endlagerung ausgedienter Brennelemente
- Bohrlocheinlagerungssystem, Komponenten und Versuchsstand (Video zu den Demonstrationsversuchen)
- Sonstige Versuche (Video zu den Versatzversuchen)
- Zusammenfassung
- Ausblick

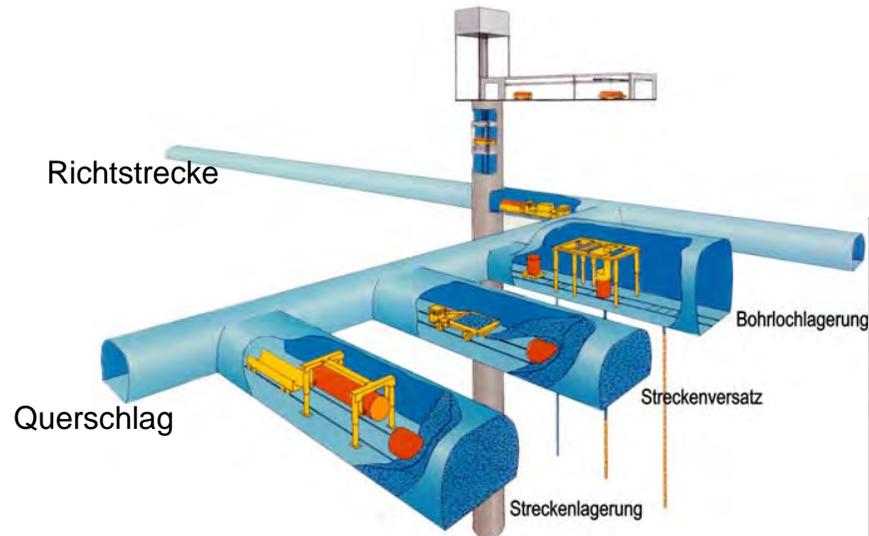
POLLUX 10-Streckenlagerung



- 1 Abschirmbehältergrundkörper
- 2 Abschirmbehälterdeckel
- 3 Innerer Behälter
- 4 Primärdeckel
- 5 Geschweißter Sekundärdeckel
- 6 Schweißnaht
- 7 Dämpfungselement
- 8 Moderatorplatte (Graphit)
- 9 Moderatorstäbe
- 10 Brennstäbe
- 11 Tragzapfen

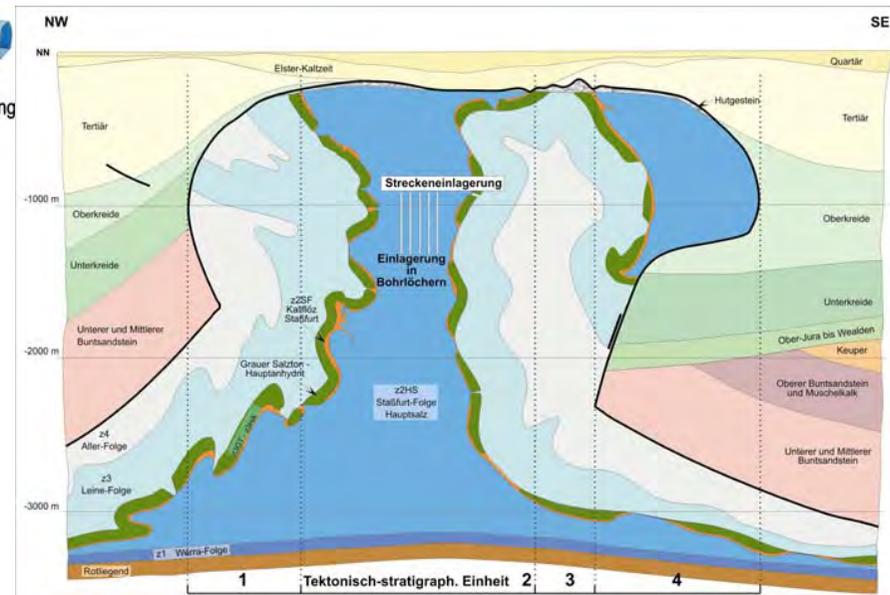
(Quelle: GNS)

Referenzendlagerkonzept



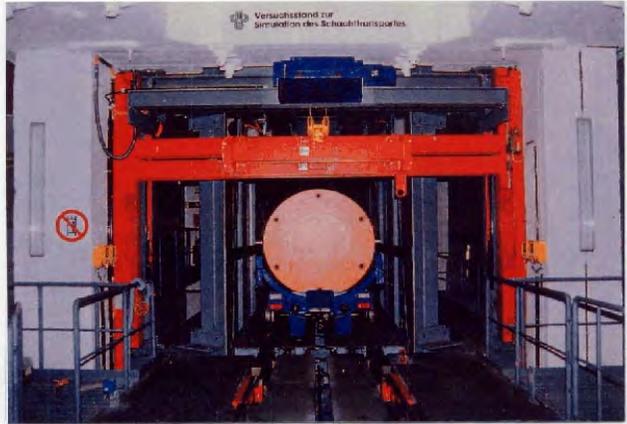
Referenzkonzept für HAW-Endlager in Salz:

- Tiefe geologische Endlagerung (Teufe: 870 m)
- Einlagerung von HAW-Kokillen in Bohrlöchern
- Einlagerung von POLLUX-Behältern in Strecken
- Versatzmaterial: Salzgrus



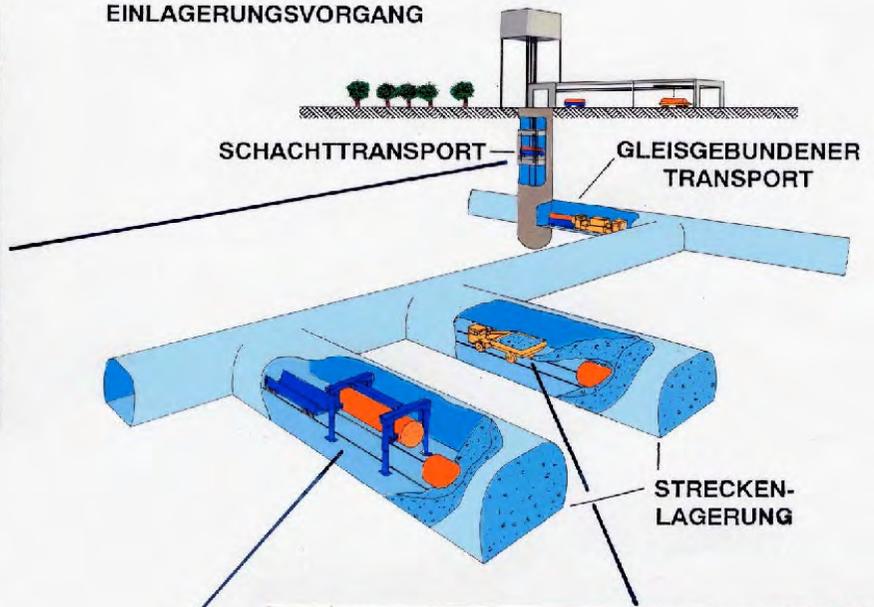
Projektion des Referenzkonzeptes in vereinfacht dargestellte Geologie des Salzstockes Gorleben

== Demonstrationsversuche DEAB ==



FÖRDERKORB MIT 85 T NUTZLAST

EINLAGERUNGSVORGANG



EINLAGERUNGSVORRICHTUNG (ELVIS)



VERSATZ-SCHLEUDERTRUCK IN EINER EINLAGERUNGSSTRECKE

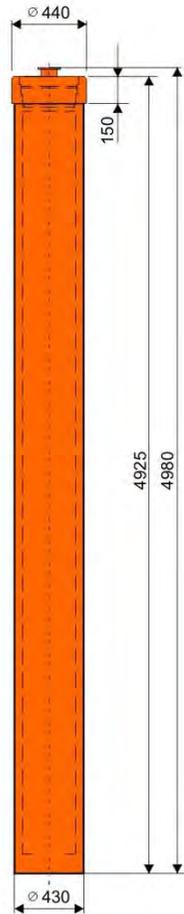
FuE-Programm

- 6. EU-Rahmenprogramm (2002 – 2006)
 - Integriertes Projekt ESDRED: Engineering Studies and Demonstration of REpository Designs
 - Entwicklung der Einlagerungstechnik für BSK 3 als Teil des ESDRED-Projektes
- Die Entwicklung der BSK 3-Einlagerungstechnologie wurde unterstützt durch:
 - Europäische Kommission, Brüssel / Belgien
 - Projektträger des Forschungszentrums Karlsruhe
Bereich Wassertechnologie und Entsorgung
(PTKA-WTE)
 - GNS, Essen

== Vorteile des Bohrlochlagerungskonzeptes ==

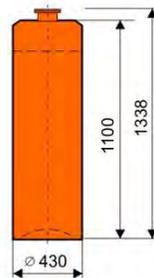
- Verbesserung des Wärmeüberganges
- Schnellerer Einschluss des Gebindes
- Verringerung der Flächenausdehnung des Endlagers durch 3-dimensionale Ausnutzung
- Einsparungen bei Endlagergebinden und Betriebskosten
- Verringerung der Gasproduktion

Abfallgebinde



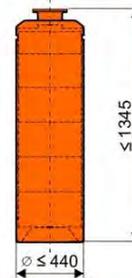
BSK 3 - Kokille

Masse: 5,20 t



HAW - Kokille
CSD - B -Kokille

0,50 t



CSD - C - Kokille

0,85 t



Endlagergebinde mit
3 HAW - Kokillen

2,4 t

BSK 3-Dummy, HAW-Kokille und Triple-Pack



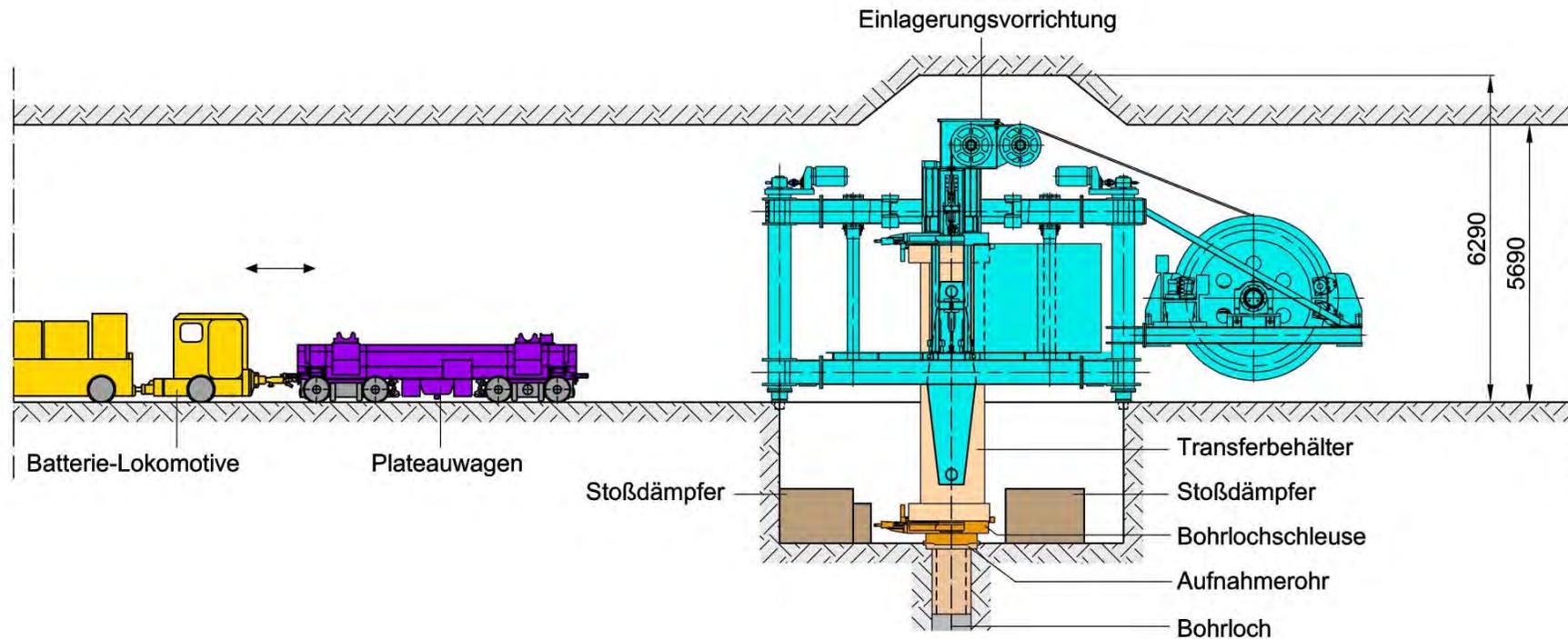
Wärmeentwickelnde Abfälle		
Verglaster HAW Kokillen 3.589	CSD-C-Kokillen* CSD-B-Kokillen 4.700	BSK 3 ca. 6.800

* Colis Standard de Déchets Compactés

BSK 3 mit 3 DWR Uran-Brennelementen:

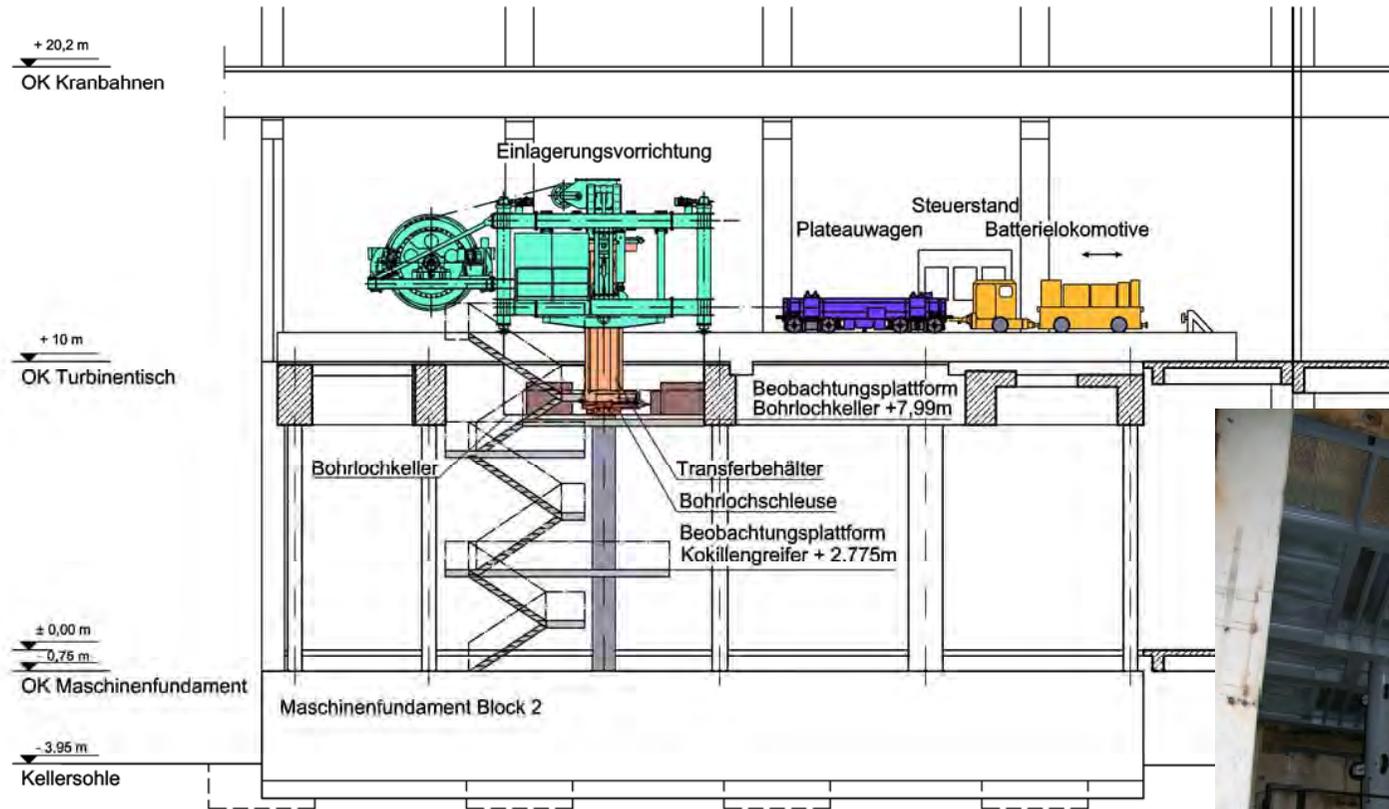
- 4 % Anfangsanreicherung,
- 50 GWd/t_{sm} Abbrand,
- 1.63 t_{SM} pro Kokille und
- max. 6 kW Nachzerfallsleistung
(wird nach einer Abklingzeit von 3 Jahren/11 Monaten erreicht)

Einlagerungssystem

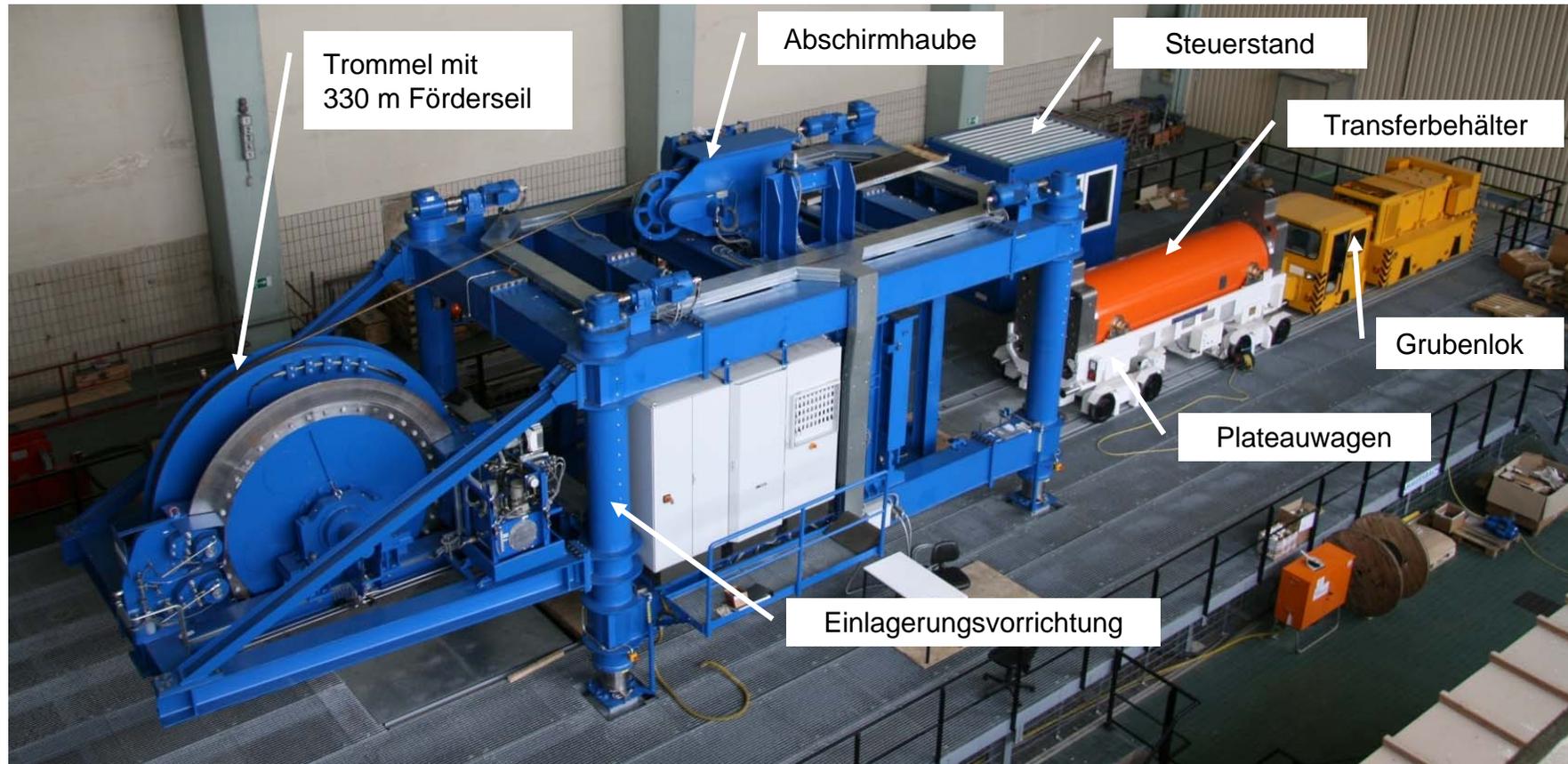


Ausgewähltes Einlagerungssystem für BSK:
Semimobile Einlagerungsvorrichtung über dem Bohrloch

Versuchsstand

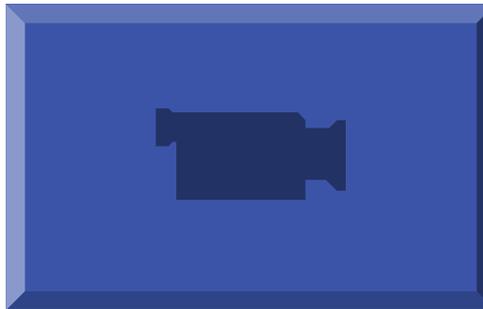


== Demonstrationsanlage Landesbergen ==



Erprobung der Transport- und Einlagerungstechnik für Brennstabkokillen
im Maßstab 1:1 (2008/2009)

Video



Ergebnisse der Demonstrationsversuche

Zuverlässigkeitsbewertung anhand dokumentierter Störungen

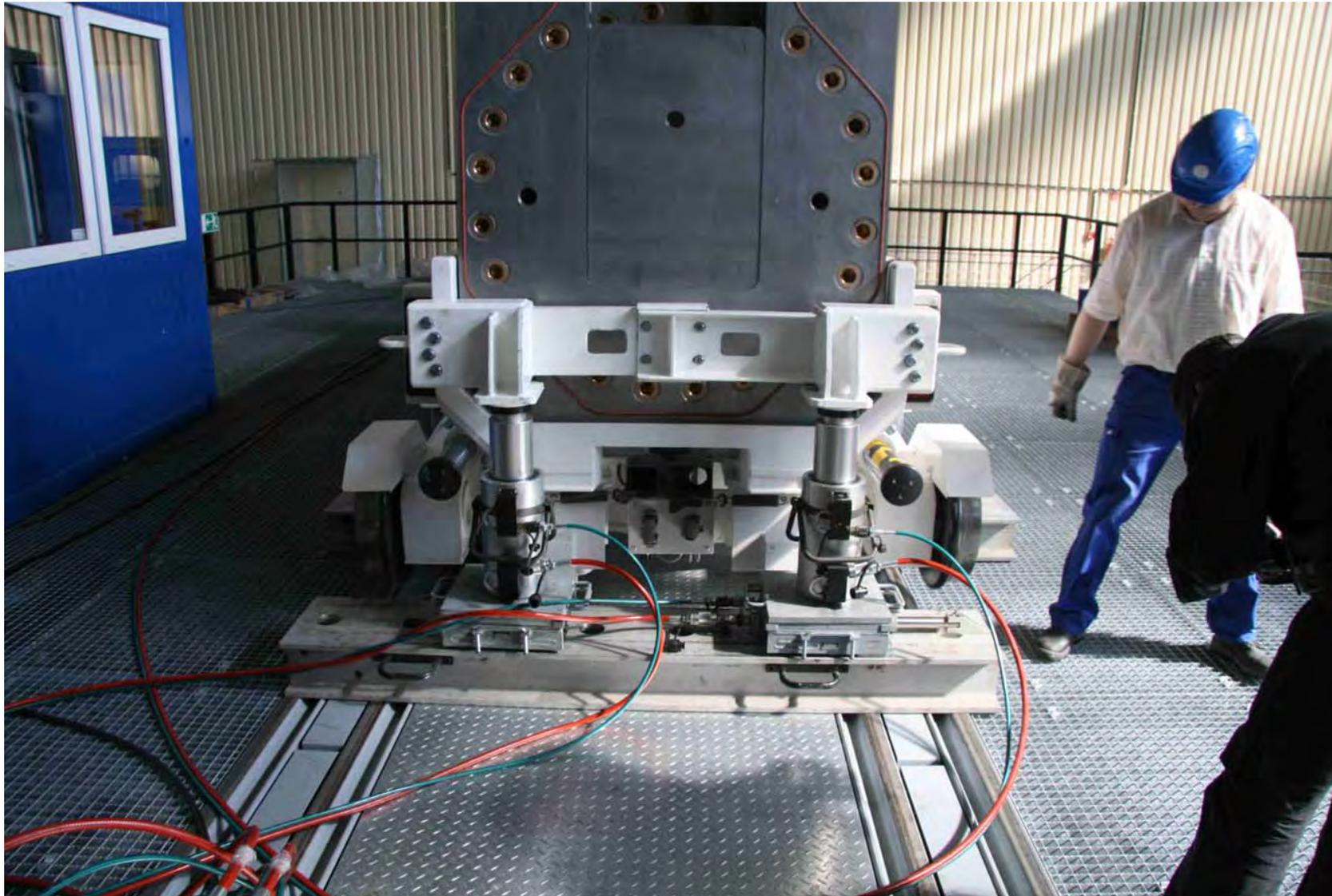
- Erprobungszeitraum: September 2008 bis Februar 2009
⇒ 1004 Handhabungsprozesse (Einlagern/Rückholen)
- Insgesamt 458 Störungen
 - Art der Störungen (47) bei Einlagerung
(Bedienungsfehler, Herstellungsfehler, irrelevante Fehler)
 - Art der Störungen (411) bei Rückholungen
(Fehler im Steuerprogramm) ⇒ für Endlager irrelevant

Fazit: Keine zufälligen Fehler und keine Auslegungsfehler

- **Zuverlässigkeit nachgewiesen**

Behebung Betriebsstörungen

- Wiedereingleisen



Behebung Betriebsstörungen

- Notbetätigung Bohrlochschleuse



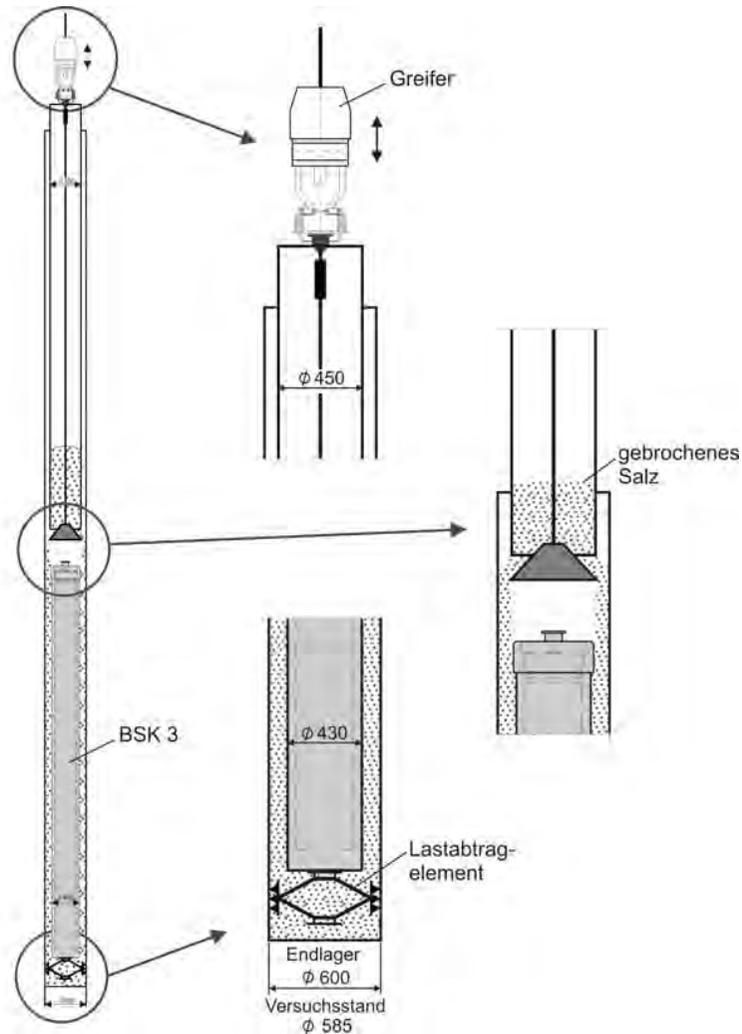
Absetzen der BSK 3 auf Salzuntergrund und Öffnen des Greifers bei max. Schrägstellung



Streckentransport Einlagerungsvorrichtung



Zusätzliche Untersuchungen

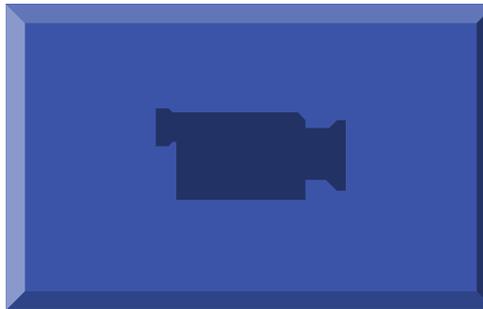


**Bohrlochverfüllung mit Salzgrus
(Versuchsschema)**

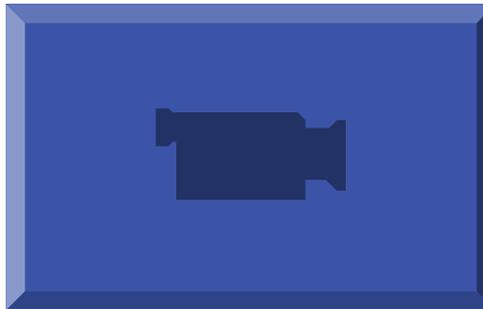


**Bohrlochverfüllung mit Salzgrus
(Foto: Versuchsstand)**

Video



Video



Alle Vorhabensziele erreicht:

- Demonstration der technischen Machbarkeit eines Systems zur Einlagerung von Brennstabkokillen
 - erfolgreiche Planung und Fertigung aller Komponenten (Berücksichtigung berg- und atomrechtlicher Aspekte)
- Zuverlässigkeit des Einlagerungssystems für BSK 3
 - nachgewiesen in einer Demonstrationsanlage durch mehr als 1000 Belastungszyklen (Einlagern oder Rückholen)
- Genehmigungsfähigkeit des Systems
 - pos. Begutachtung durch externe Sachverständige

Alle Vorhabensziele erreicht:

- Systemtauglichkeit auch für Einlagerung von HAW-Kokillen in Triple-Pack
 - nachgewiesen durch zusätzliche 110 Belastungszyklen mit HAW-Triple-Pack
- Versatztechnik für Bohrlochbefüllung
 - nachgewiesen durch Demonstration der Verfüllung Ringraum zwischen BSK 3 und Bohrlochwand

Ausblick

- Überprüfung des Einlagerungssystems unter Tage erforderlich
 - Salzstaub
 - Temperatur
- Erstellung eines Einlagerungsbohrlochs (Bohrtechnik)
- Ermittlung der maximalen Bohrlochteufe (Gebindestabilität)

„Geheime“ Eröffnung des Versuchsstandes 2008



DBE TECHNOLOGY GmbH



**Vielen Dank
für Ihre Aufmerksamkeit.**

Referenzkonzept für die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktive Abfälle in Tonstein in Deutschland (Akronym: ERATO)

**Dipl.-Ing. Wilhelm Bollingerfehr, Dr.-Ing. Matthias Pöhler
DBE TECHNOLOGY GmbH
Peine**

Einleitung

Ende der 90er Jahre hat die Bundesregierung entschieden, neben Salz auch alternative Wirtsgesteine zu untersuchen. Dadurch traten Überlegungen zur Endlagerung in Tonformationen in Deutschland weiter in den Vordergrund. Erste Ansätze hinsichtlich einer Endlagerkonzeption für Wiederaufarbeitungsabfälle und ausgediente Brennelemente in einer Tonformation wurden in den inzwischen abgeschlossenen FuE-Vorhaben GEIST /1/ und GENESIS /2/ entwickelt. Auf dieser Basis sollen in dem FuE-Vorhaben „Entwicklung eines Referenzkonzeptes für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in Tonstein in Deutschland“ weitere Grundlagen für eine Endlagerauslegung im Tonstein erarbeitet und ein Referenzendlagerkonzept geplant werden (Folie 1).

Im Gegensatz zur Endlagerung in einer Salzformation ist für Tonstein vorgesehen, sämtliche Endlagerbehälter mit einer 30 cm dicken Barriere aus Bentonitformteilen zu ummanteln. Diese geotechnische Barriere hat die Aufgabe, mögliche Lösungszutritte zu den Behältern zu verzögern und umgekehrt einen Rückhalteeffekt für in Lösung gegangene Radionuklide zu gewährleisten. Als thermische Auslegungsrandbedingung ist eine auf 100°C begrenzte Temperatur an der Kontaktfläche zu dieser geotechnischen Barriere vorgegeben; im Salz beträgt dieses Limit 200°C. Um die Wärmeleitung in das Wirtsgestein Ton zu verbessern, wird deshalb bei den Endlagerbehältern für ausgediente Brennelemente zusätzlich eine wärmeverteilende Sandschicht (heat spreader) zwischen Behälter und Ummantelung mit einer Dicke von 20 cm eingeschaltet und die Behälter nur mit den gezogenen Brennstäben von 3 DWR-BE beladen. Dies entspricht unter geometrischen Gesichtspunkten einer Beladung mit 9 SWR-BE bzw. 7,5 WWER-BE. Unter Zugrundelegung des vorgegebenen Mengengerüsts des Ausstiegsszenarios ergeben sich insgesamt 6818 BSK 3; gefüllt mit ausgedienten Brennelementen. Darüber hinaus sind 3767 HAW-Kokillen sowie 7462 CSD-B und CSD-C endzulagern.

Potenzielle Standortregion

Als potenzielle Standortregion für das generische Endlager wurde eine Unterkreidetonformation im Niedersächsischen Becken (Nord-1) für dieses Vorhaben gewählt. Dort ist die Errichtung des HAW-Endlagers in einer vergleichsweise geringen Teufe von etwa 350 m bei gleichzeitig relativ hoher Einlagerungsdichte möglich (Folien 2 und 3). Durch die geringe Teufenlage ergeben sich ferner Vorteile im Hinblick auf das Abteufen der Schächte und geringere Anforderungen an den notwendigen Ausbau der Grubenbaue.

Einlagerungskonzepte und Auswahl Referenzkonzept

In den FuE-Vorhaben GEIST und GENESIS wurde für die Endlagerung von ausgedienten Brennelementen die Einlagerung von POLLUX-Behältern in horizontalen Strecken des Endlagerbergwerkes oder alternativ unter Verwendung von Brennstabkokillen (BSK 3) die Einlagerung in vertikalen und ca. 50 m tiefen Bohrlöchern betrachtet (Folie 4 und 5). Für diese beiden grundsätzlichen Einlagerungskonzepte erfolgte im Rahmen dieses Vorhabens ERATO eine Untersuchung und Bewertung denkbarer Einlagerungsvarianten – jeweils 4 – sowie die Bewertung und Auswahl von ermittelten Vorzugsvarianten (Folien 6 – 16). In einem weiteren Schritt wurde ein Vergleich der beiden Vorzugsvarianten für die Bohrloch- und Streckenlagerung durchgeführt, bei dem sich das Konzept der Bohrlochlagerung hier als das bessere darstellte (Folien 17 – 19). Als wesentliche Vorteile für die Vorzugsvariante Bohrlochlagerung wurden folgende Punkte identifiziert (Folie 20 und 21):

- Geringerer Endlagerflächenbedarf (3,8 km² statt 6,9 km²)
- Geringere Streckenlängen (100 km statt 210 km)
- Geringere Massen der Transporteinheiten (51 t statt 86 t)
- Geringeres Stahlaufwand (7 t statt 54 t)
- Gebirgsverbundene Einbettung von BSK 3 und Bentonitbarriere

Für das in den weiteren Planungen zugrunde gelegte Konzept der Bohrlochlagerung ist vorgesehen, in das mit einem Außenliner ausgekleidete Bohrloch zunächst die aus einer Bentonitbodenplatte und Bentonitringen bestehende geotechnische Barriere komplett im Bohrloch einzubringen. Anschließend wird die BSK 3 im Wechsel mit dem als heat spreader wirkenden Versatzmaterial eingelagert, welches auch den Ringraum zwischen BSK 3 und Bentonitringen füllt. Die Zentrierung der BSK 3 wird dabei durch vorab mit den Bentonitringen eingebrachte Centralizer gewährleistet. Der Verschluss des Bohrlochs erfolgt durch einen in den obersten Bentonitring eingesetzten Bentonitpfropfen. Der Raum oberhalb des Bohrlochpfropfens wird im Hinblick auf einen Zutritt zementhaltiger Lösungen aus dem Streckenausbau mit Bentonitgranulat oder mit plastischem Ton als sorbierende Schicht verfüllt. Die Verwendung des als Sturzversatz eingebrachten heat spreaders auch als Verfüllmaterial bis zur nächsten Kokillenabsetzposition ist mit einem einfachen Betriebsablauf verbunden. Sofern aus Gründen der Langzeitsicherheit erforderlich, ist das Einbringen von Zwischenlagen aus Wirtsgestein und/oder Bentonitgranulat zwischen den Kokillen jedoch möglich.

Die Einlagerung der WA-Abfälle (HAW-Kokillen, CSD-B und CSD-C) erfolgt auf dieselbe Weise, jedoch ohne das Erfordernis, einen heat spreader vorsehen zu müssen. Die Kokillen werden mit einbautechnisch geringst möglichem Ringspalt im Wechsel mit Versatz (Wirtsgestein und/oder Bentonitgranulat) in das mit Außenliner und Bentonitringen ausgekleidete Bohrloch eingebracht.

Basierend auf thermomechanischen Auslegungsrechnungen, gebirgsmechanischen und betrieblichen Erwägungen wurden Bohrloch- und Streckenabstände festgelegt und die bis zu etwa 400 m langen Strecken zu Einlagerungsfeldern bzw. zu Einlagerungsabteilungen so zusammengefasst, dass unter anderem die Herstellung der Einlagerungsstrecken und bohrlöcher in Spätestlage in Bezug auf die Nutzung dieser Grubenbaue für die Einlagerung sowie

eine rückbauartige Einlagerung von den Grubenfeldgrenzen zu den zentral gelegenen Schächten möglich ist. Der Anschluss der Einlagerungsfelder an die Schächte erfolgt über ein 3-Streckensystem, von denen zwei Strecken (Haufwerksstransport und Gebindetransportstrecke) als Frischwetterzubringer dienen und eine Strecke als gemeinsame Abwetterstrecke fungiert.

Der Umfang für die Herstellung und Herrichtung der Grubenbaue (Folie 22-26) ist hoch und erfordert zahlreiche Betriebspunkte, die wettertechnisch versorgt und transportlogistisch an die betriebliche Infrastruktur angeschlossen werden müssen. Anhand von detaillierten Betriebsabläufen konnte gezeigt werden, dass bei der durch insgesamt hohes Gesamtaufkommen bei gleichzeitig nur geringer Kokillenzahl pro Bohrloch zeitführenden Einlagerung von BSK 3 ein Einlagerungsfortschritt in der Größenordnung von 0,5 Gebinden pro Arbeitstag unter den oben genannten Gesichtspunkten sowie im Hinblick auf die zeitgleiche Einlagerung der WA-Abfälle als realistisch anzusehen ist (Folie 27). Für die 6818 einzulagernden BSK 3 ergibt sich damit eine Einlagerungsdauer von etwa 55 Jahren. Unterstellt man bei den WA-Abfällen die gleiche kampagnenweise Einlagerung wie bei den BSK 3, betragen die Einlagerungsdauern für die HAW-Kokillen ca. 21 Jahre und für die CSD-B und CSD-C ca. 40 Jahre.

Das für dieses Referenzkonzept entwickelte Verfüll- und Verschlusskonzept (Folie 28 und 29) sieht für die Verfüllung des überwiegenden Teils der untertägigen Grubenbaue aus Kostengründen Haufwerksmaterial aus der Auffahrung vor. Aufgrund der parallel zum Einlagerungsbetrieb stattfindenden Herstellung der Einlagerungsstrecken kann das für Versatzzwecke erforderliche Haufwerk untertage verbleiben und ist damit keinen Witterungseinflüssen ausgesetzt. Es wird direkt im Umlauf untertage von einem an den Kontrollbereich angrenzenden Haufwerksbunker abgezogen und den Versatzbetriebspunkten zugeführt. Das restliche Haufwerk wird zutage gefördert und aufgehaldet. Für die zum Ende der Betriebsphase verbliebenen Grubenbaue kann aufgrund der dann beendeten Auffahrungsarbeiten nur aufbereitetes Haldenmaterial oder Fremdversatz verwendet werden. Der Verschluss des Endlagers erfolgt durch Streckenverschlussbauwerke im schachtnahen Bereich und die dazu redundant und/oder diversitär ausgelegten Schachtverschlüsse.

Das unter Zugrundelegung des Mengengerüsts entworfene HAW-Endlager (Folie 30) ist in zwei Flügel unterteilt. Ein Flügel dient der Endlagerung der ausgedienten Brennelemente und der andere der Endlagerung der WA-Abfälle. Im zentralen Mittelfeld befinden sich neben den Schächten die erforderlichen Grubennebenräume. Der Gesamtflächenbedarf des Endlagers beträgt ca. 6,5 km².

Zeit- und Kostenschätzung

Unter der Annahme, dass der Zeitraum für die Begutachtung, Auslegung und Erörterung der Planunterlagen bis zum Planfeststellungsbeschluss im Rahmen des atomrechtlichen Genehmigungsverfahrens einen Zeitraum von 10 Jahren beansprucht und mit der Errichtung unmittelbar nach Planfeststellungsbeschluss begonnen wird, ergibt sich von Beginn der übertägigen Erkundung bis zum Ende der Rekultivierung der Tagesoberfläche ein Zeitraum von 104 Jahren. Hiervon entfallen einschließlich der Herstellung der ersten und Versetzen

der letzten Einlagerungsstrecke 56,5 Jahre auf die Betriebsphase. Von der Differenz von 47,5 Jahren werden 39,5 Jahre für den Zeitraum von Beginn der übertägigen Erkundung bis zum Beginn der Betriebsphase benötigt und 8 Jahre für die Stilllegungsphase. Wobei für die Stilllegung ein Nachlauf von einem Jahr für den Abriss der restlichen Tagesanlagen und die Rekultivierung der Tagesoberfläche im Anschluss an die Schachtverfüllung berücksichtigt wurde.

Die Kostenabschätzung für Erkundung, Errichtung, Betrieb und Stilllegung des HAW-Endlagers führte zu Gesamtkosten von etwa 11 Milliarden EUR (netto). Darin enthalten sind auch die Kosten für Planung und Genehmigung, Kosten der Behörden und FuE-Bedarf. Es sei hier angemerkt, dass es sich bei den für einzelne Aufgaben ermittelten Kosten einerseits in Ermangelung belastbarer Angaben zum Teil um grobe Abschätzungen handelt und dass diesen Kosten andererseits bestimmte Annahmen zugrunde liegen. Dies sind unter anderem angenommene Dauern für bestimmte Phasen oder Vorgänge, die proportional Einfluss auf die Kosten nehmen (z. B. Kosten für die Offenhaltung des Betriebs während des Planfeststellungsverfahrens) sowie Kostenansätze im Detail (z. B. Ansätze für Durchführung von Arbeiten als Fremdleistung, Herstellung der Bentonitformteile usw.). Insofern ist eine Heranziehung der Gesamtkosten zu Vergleichszwecken nur unter Beachtung der hier im Detail zugrunde gelegten Randbedingungen möglich und sinnvoll. Insgesamt betrachtet sind die ermittelten Gesamtkosten als grober Anhaltswert zu verstehen, der eher nach oben als nach unten abweichen kann.

Ausblick

Der FuE-Bedarf für die Realisierung eines HAW-Endlagers in Tonstein ist im Wesentlichen auf mit dem vorgeschlagenen Einlagerungskonzept verbundene Fragestellungen beschränkt. Untersuchungsbedarf besteht in erster Linie in Bezug auf die Möglichkeit, sowohl für die korrekte Implementierung der technischen und geotechnischen Barrieren sowie des Versatzes als auch für die Langzeitsicherheit Nachweise zu führen. Jede Barriere hat ihre Schutzfunktion, deren Wirksamkeit im Vorfeld nachgewiesen werden muss. Die korrekte Beschreibung des Systemverhaltens unter den Randbedingungen der technischen Implementierbarkeit steht dabei im Vordergrund. Darüber hinaus ergibt sich in begrenztem Umfang Entwicklungsbedarf bei den Betriebsmitteln für die Herstellung und Herrichtung sowie für das Einlagern und Versetzen der Einlagerungsbohrlöcher.

Danksagung

Das FuE-Vorhaben wurde mit Mitteln des BMWi vom Projektträger Karlsruhe für Wassertechnologie und Entsorgung gefördert.

Das Institut für Bergbau, Maschinelle Betriebsmittel und Verfahren im Bergbau unter Tage der TU Clausthal, das die Untersuchungen zur Herstellung von Schächten und Bohrlöchern und zum Auffahren von Grubenräumen durchgeführt hat, lieferte einen wesentlichen Beitrag zur Bewertung der Realisierbarkeit eines Endlagers in Tonstein.

Literaturverzeichnis

- /1/ [Filbert et al. 2004]:
Gegenüberstellung von Endlagerkonzepten in Tongestein und Salz, Vergleich der technischen Endlagerkonzepte im Wirtsgestein Tongestein und Salz – GEIST, Peine, 2004
- /2/ [Jobmann et al. 2007]:
Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Auslegung eines generischen Endlagers im Tongestein in Deutschland – GENESIS, Abschlussbericht, Peine, 2007

== Zielsetzung und Randbedingungen ==

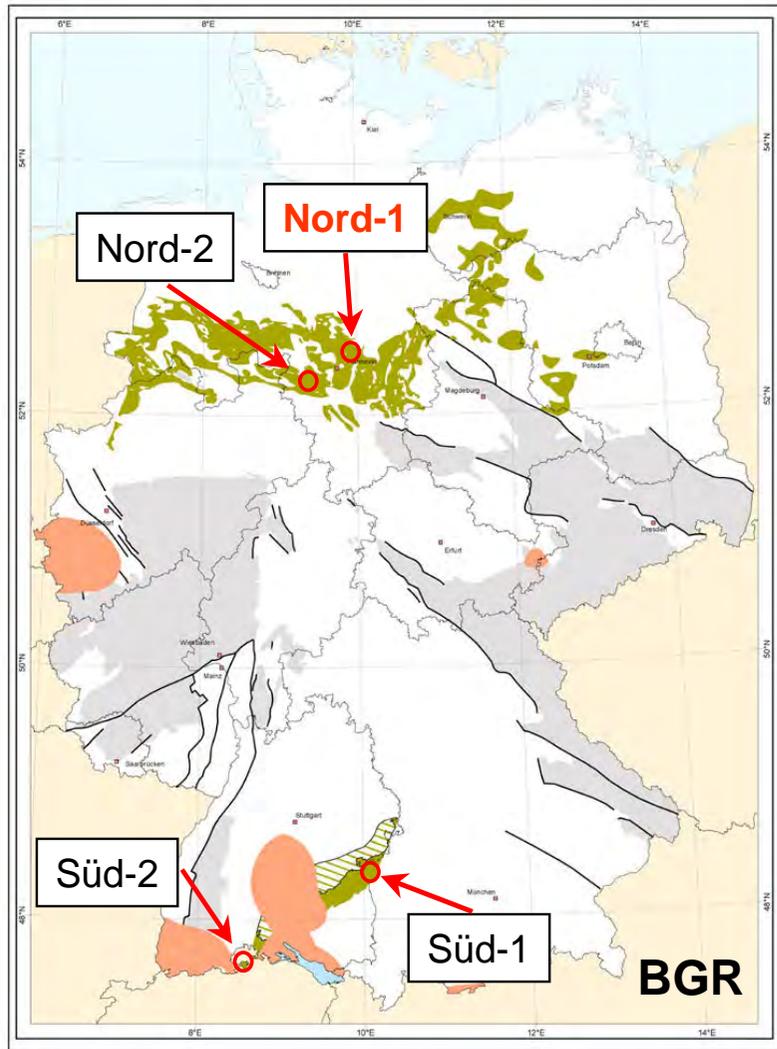
Ziel des FuE-Vorhabens ERATO:

- Entwicklung eines Referenzkonzeptes für ein HAW-Endlager in Tongestein in Deutschland

Randbedingungen:

- Modellhafte Standortdaten
- Ergebnisse bisheriger FuE-Vorhaben
- $T_{\max} = 100^{\circ}\text{C}$ (Kontakt Endlagerbehälter/geot. Barriere)
- Geotechnische Nahfeldbarriere am Endlagerbehälter

Modellregionen



Zwischenergebnisse der
"Regionalen Tonstudie"
der BGR

-  Aussichtsreiche Tonformationen
Mächtigkeit > 100 m
Tiefenlage > 300 m / < 1000m
-  Erdbebenzone > 1 (DIN 4149)
-  Modellregionen

www.bgr.bund.de

Auswahl: Referenzstandortregion Nord 1

Gründe:

- ausgedehnte Einlagerungsschicht (Hedbergellen-Mergel)
 - Mächtigkeit von 200 m
 - geschlossene Tonformation von 1200 m
 - flächige Ausdehnung über mehrere 100 km²
- geringe Teufe: ca. 350 m
 - vorteilhaft hinsichtlich Schachtabteufen, Gebirgstemperatur, potenziellem Wärmeeintrag und Ausbau
- Erdbebenzone 0

Einlagerungskonzepte für ausgediente Brennelemente

Ausgangsbasis: Ergebnisse aus FuE-Vorhaben GEIST und GENESIS

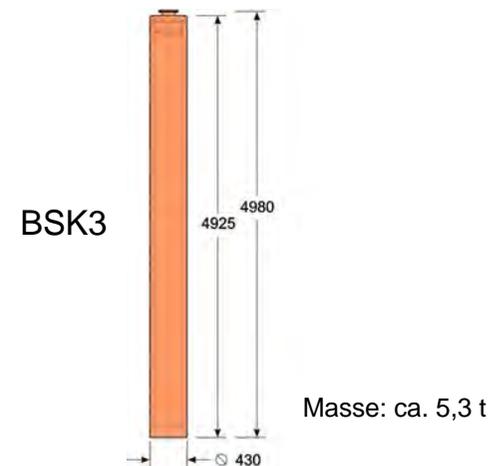
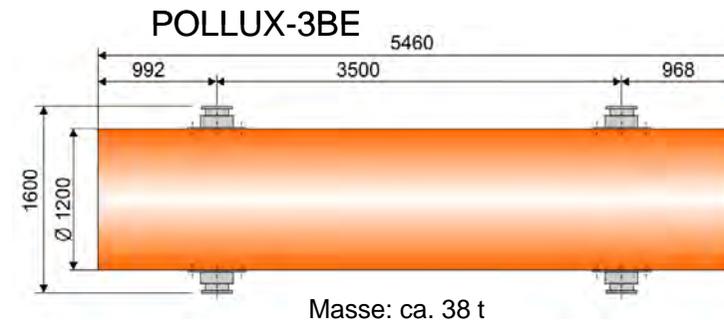
Hauptvariante 1

Streckenlagerung für ausgediente Brennelemente in POLLUX-3BE

oder

Hauptvariante 2

Bohrlochlagerung für ausgediente Brennelemente in Brennstabkokillen in 50 m tiefen Bohrlöchern

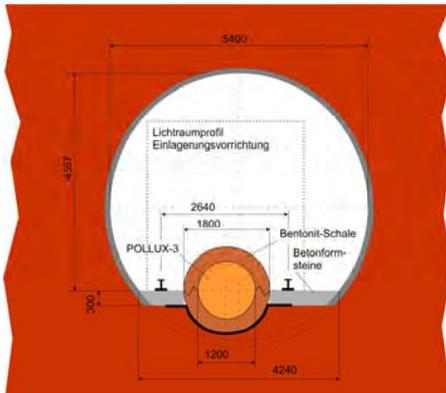


Grundlagen (2/2)

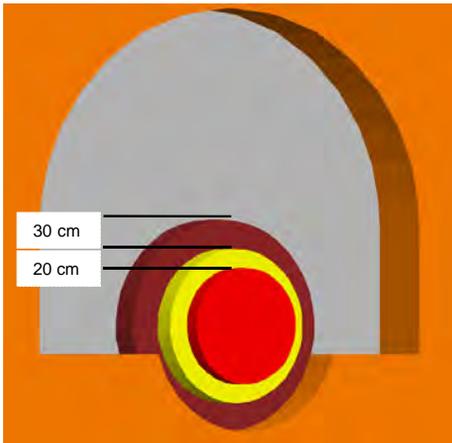
Einlagerungskonzepte für ausgediente Brennelemente

(Konzepte gemäß FuE-Vorhaben GEIST und GENESIS)

Streckenlagerung

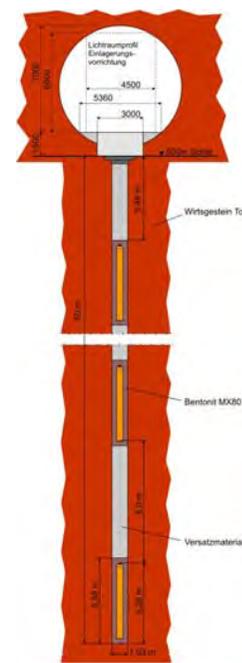


GEIST
(nur Bentonit)

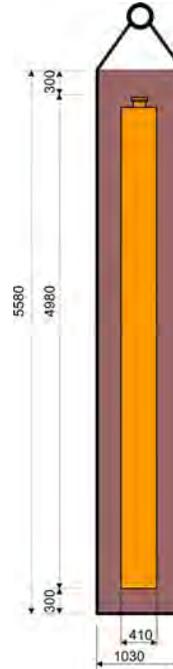


GENESIS
(B. mit Sand)

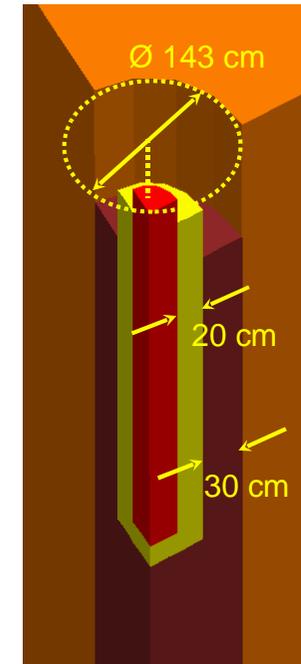
Bohrlochlagerung



GEIST: BSK2 (nur Bentonit)

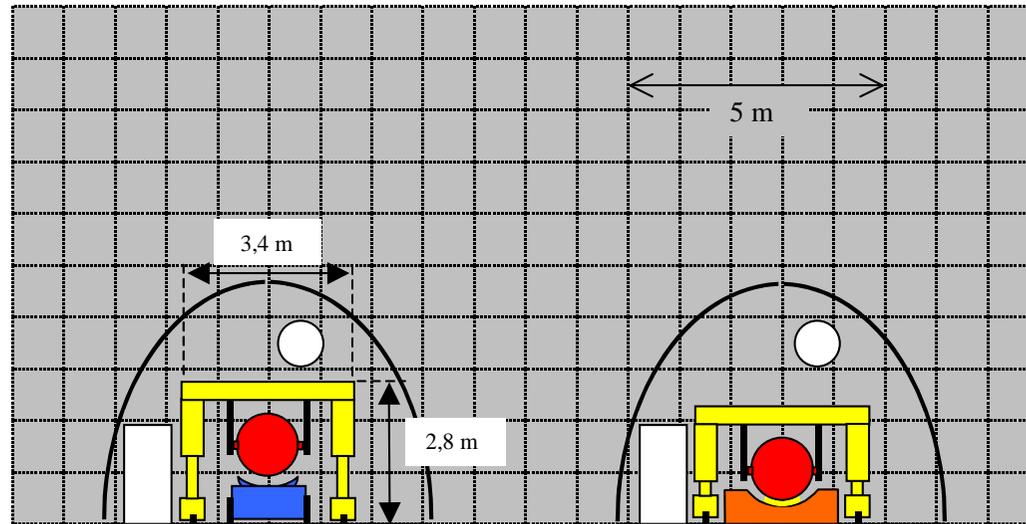
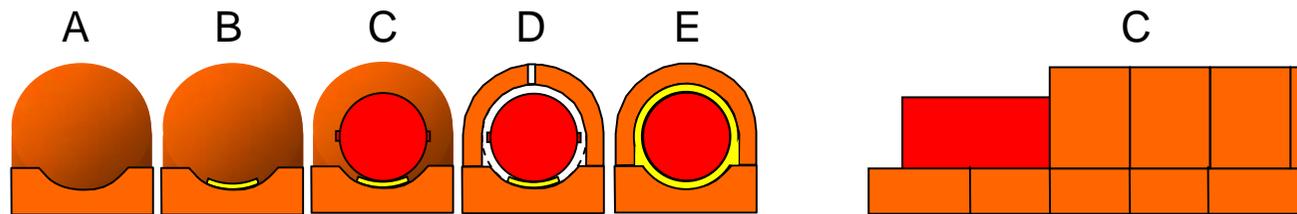


GENESIS: BSK3 (B. mit Sand)



Einlagerungsvarianten

Streckenlagerung: Variante 1 - POLLUX, Bentonitummantelung und Sand einzeln



lichter Streckenquerschnitt: ca. 22 m² bis 24 m²

Einlagerungsvarianten

Streckenlagerung:

Variante 2 - POLLUX mit Sand in Container, Bentonitummantelung einzeln

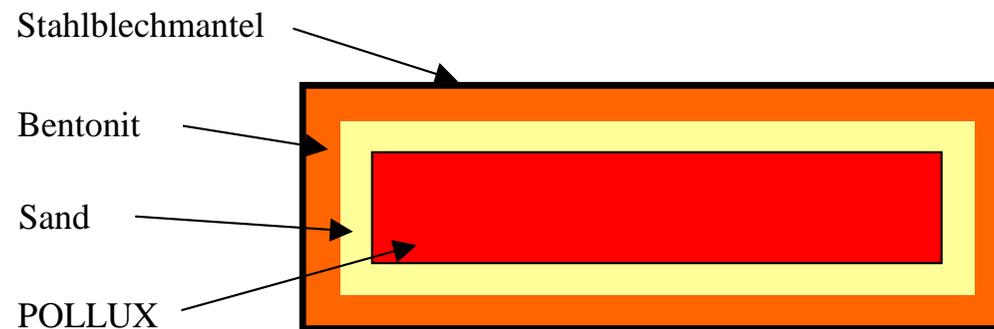
- lichter Streckenquerschnitt: ca. **22 m² bis 24 m²**

Variante 3 - Bentonitummantelung mit Sand in Büchse, POLLUX einzeln

- lichter Streckenquerschnitt: ca. **28 m²**

Einlagerungsvarianten

Streckenlagerung: Variante 4 – POLLUX mit Sand und Bentonitummantelung in Supercontainer



Masse: ca. 86 t
Länge: ca. 6,5 m
Durchmesser: ca. 2,25 m

- 3 Untervarianten
- Variante 4.1 - verfahrbares Hubportal mit Scherenhubvorrichtung
 - Variante 4.2 - ortsfestes Hubportal und verllorener Einlagerungswagen
 - Variante 4.3 - Einlagerungsfahrzeug mit Horizontalvorschubeinrichtung und Drehbühne

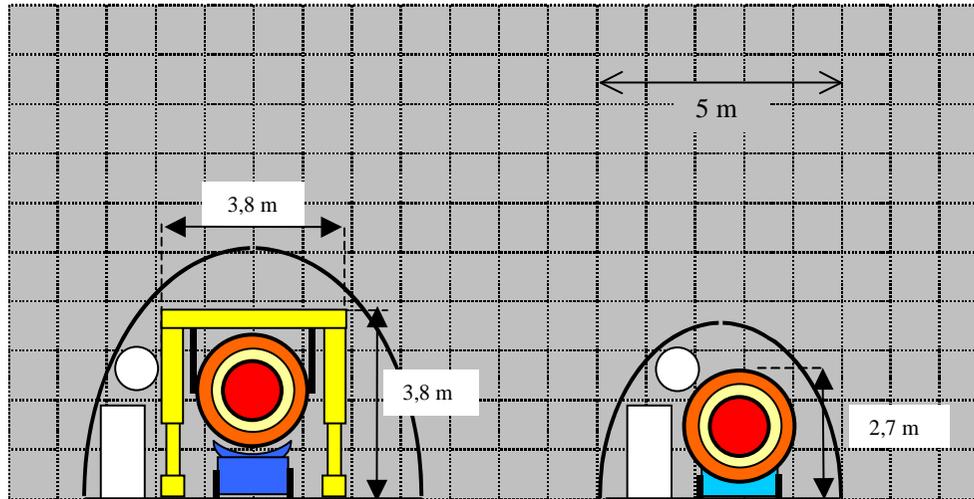
Einlagerungsvarianten

Bewertung der Varianten für die Streckenlagerung

	V1 POLLUX	V2 Container	V3 Büchse	V4/1 SC	V4/2 SC	V4/3 SC
lichter Querschnitt Einl.-Strecke	o (23 m ²)	o (23 m ²)	o (23 m ²)	o (21 m ²)	+ (14 m²)	- (22/65m ²)
spez. Auffahrvol.	-	-	-	-	+	-
Einl.-Fortschritt V4/3 o. Versatz	-	-	-	o	+ o	o +
Offenstandszeit Einl.-Strecke	o	o	o	+	+	-
Gewichte (Gebinde, Büchse)	+ (38 t)	o (56 t)	o (47 t)	- (86 t)	- (86 t)	- (86 t)
Spurweite Einl.- Strecke	o (BS)	o (BS)	- (NS+BS)	o (BS)	+ (NS)	+ (NS)
Spurweite außer Einl.-Strecke	k. Bew. (NS)	k. Bew. (NS)	k. Bew. (NS)	k. Bew. (NS)	k. Bew. (NS)	k. Bew. (NS)
Betriebssicherheit	-	o	-	o	+	o
Strahlenbelastg. bei Störungsbeseitigung	-	o	-	+	+	+

BS: Breitspur
NS: Normalspur

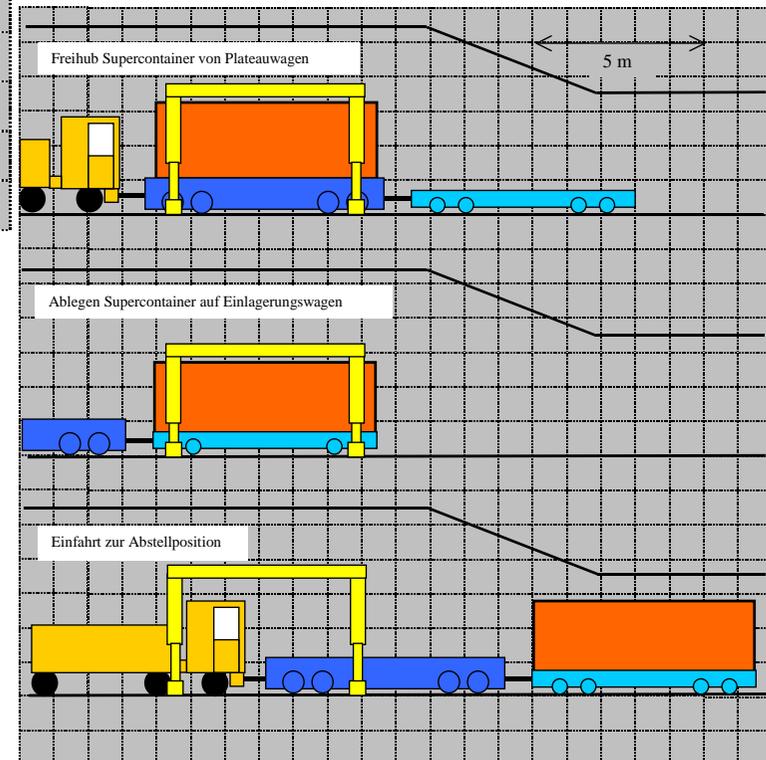
Auswahl Vorzugsvariante für die Streckenlagerung



Untervariante 4/2

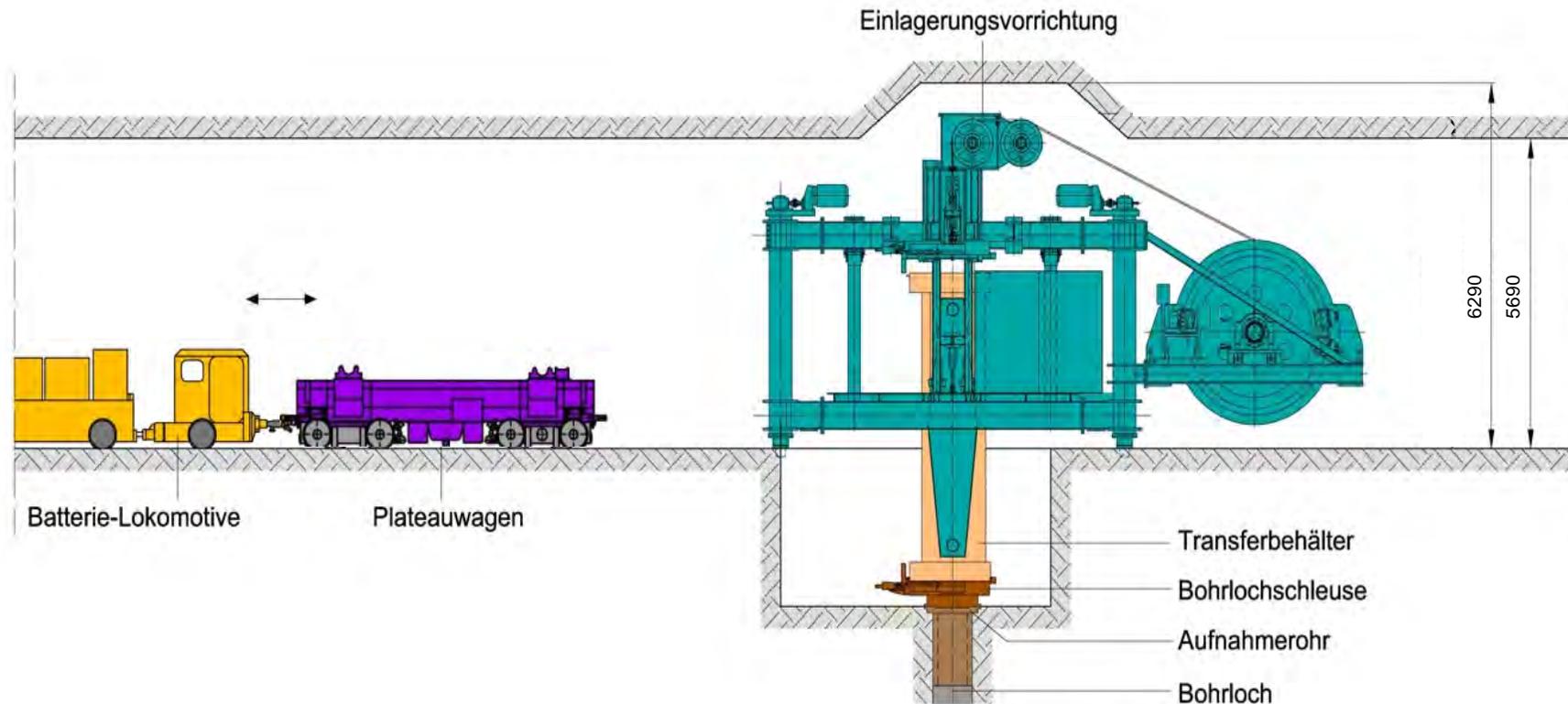
Gründe:

- Geringe Streckenquerschnitte (14 m^2)
- Geringe Offenstandszeiten der Strecken (ca. 1 Jahr bei Streckenlänge von ca. 400 m (17 Gebinde))
- Hoher Einlagerungsfortschritt (ca. 7 Sch. pro Gebinde incl. Versetzen)
- Einfache Betriebsabläufe
- Geringe Störanfälligkeit



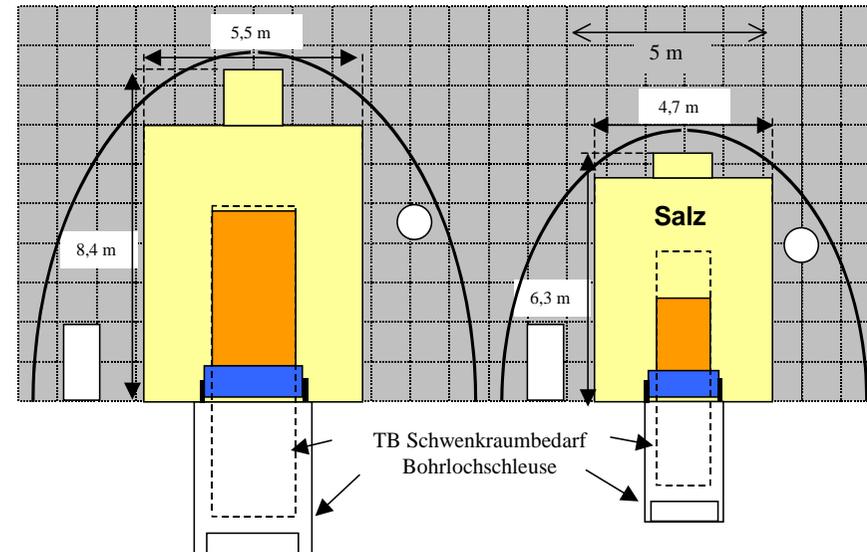
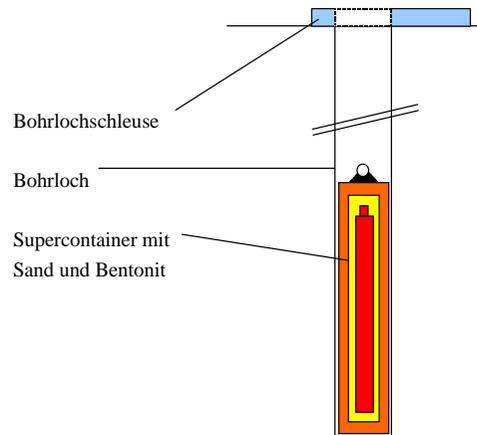
Einlagerungsvarianten

Bohrlochlagerung: Ausgangspunkt; Konzept zur Einlagerung von Brennstabkokillen (BSK 3) in Salzformation



Einlagerungsvarianten

Bohrlochlagerung: Variante 1 – BSK 3 mit Sand und Bentonitummantelung in Supercontainer



• Lichter Streckenquerschnitt		
• Massen		
o Supercontainer:	27,4 t	(5,3 t)
o Transferbehälter:	99,1 t	(46 t)
o Transferbehälter incl. Supercontainer:	126,5 t	(51,4 t)
• Abmessungen		
o Länge Supercontainer:	6,32 m	(4,98 m)
o Durchmesser Supercontainer:	1,47 m	(0,43 m)
o Länge Transferbehälter:	6,9 m	(5,57 m)
o Breite Transferbehälter:	2,11 m	(1,33 m)
o Höhe Transferbehälter:	4,0 m	(1,89 m)

Einlagerungsvarianten

Bohrlochlagerung:

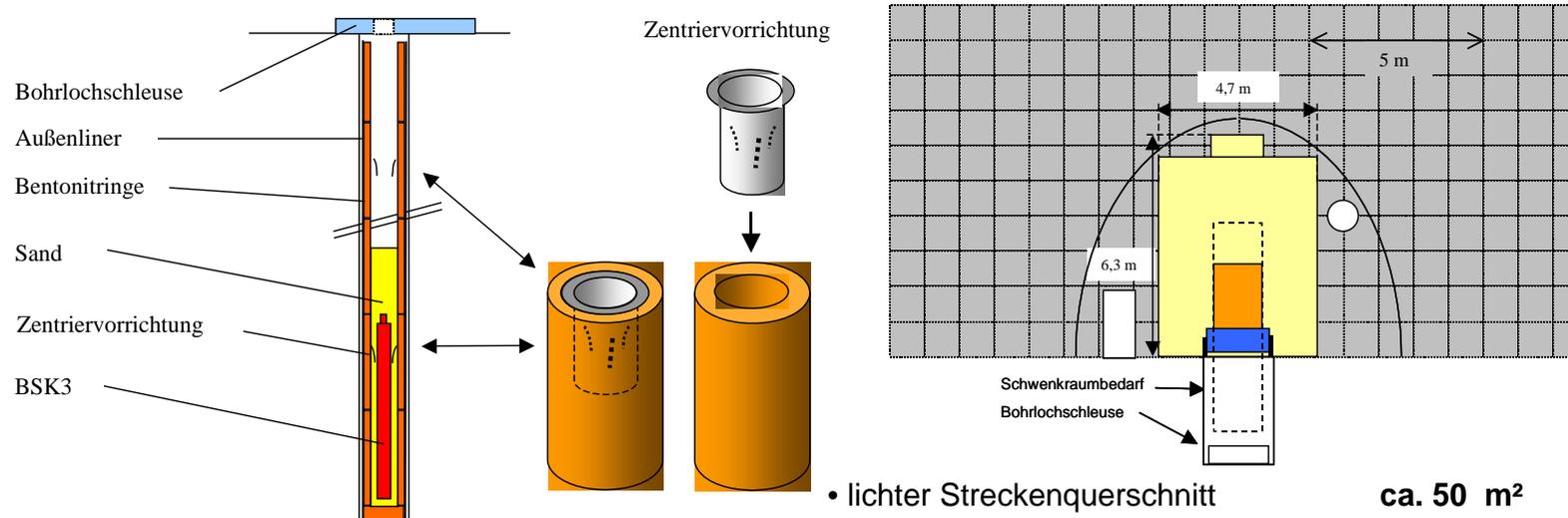
Variante 2 - BSK 3 mit Sand in Container, Bentonitummantelung einzeln

- lichter Streckenquerschnitt ca. **65 m²**
- Masse Transportbehälter ca. **80 t**

Variante 3 - Bentonitummantelung mit Sand in Büchse, BSK 3 einzeln

- lichter Streckenquerschnitt ca. **50 m²**
- Masse Transportbehälter ca. **51 t**

Bohrlochlagerung: Variante 4 - Bentonitummantelung und Sand einzeln



- lichter Streckenquerschnitt **ca. 50 m²**
- Massen
 - o BSK3: 5,3 t
 - o Transferbehälter: 46 t
 - o Transferbehälter incl. BSK3: **51,4 t**
- Abmessungen
 - o Länge BSK3: 4,98 m
 - o Durchmesser BSK3: 0,43 m
 - o Länge Transferbehälter: 5,57 m
 - o Breite Transferbehälter: 1,33 m
 - o Höhe Transferbehälter: 1,89 m

Einlagerungsvarianten

Bewertung der Varianten für die Bohrlochlagerung

	V1 SC	V2 Container	V3* Büchse	V4 BSK3
lichter Quer schnitt Einl. -Strecke	- (80 m ²)	o (65 m ²)	+ (50 m ²)	+ (50 m ²)
spez. Auffahrvol. Einl. -Fortschritt	- (7 m ³ /Geb.) V	o (2,6 m ³ /Geb.) V+B o. BP	+ (0,7 m ³ /Geb.) HS+B o. BP	+ o (4,4 m ³ /Geb.) HS+BP
Offenstandszeit Einl. -Strecke	-	o	+	+
Gewichte (Transferbehälter)	- (126 t)	o (80 t)	+ (51 t)	+ (51 t)
Spurweite Einl. - Strecke	- (BS 2,7 m)	o (BS 2,2 m)	+ (BS 1,9 m)	+ (BS 1,9 m)
Spurweite außer Einl. -Strecke	- (NS o. BS)	o (NS o. BS)	+ (BS)	+ (BS)
Betriebssicherheit	k. Bew.	k. Bew.	k. Bew.	k. Bew.
Strahlenbelastg. bei Störungsbeseitigung	k. Bew.	k. Bew.	k. Bew.	k. Bew.

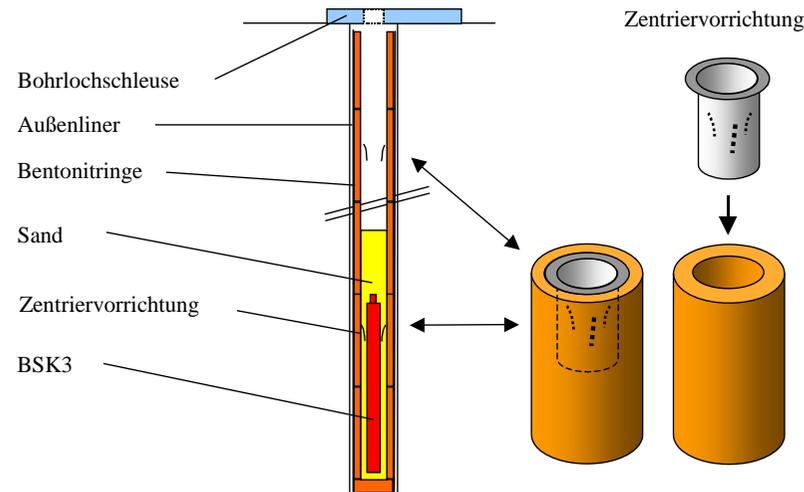
*: Variante 3 entfällt, da technische Barriere aus Bentonitringen nicht durchgängig aufgebaut werden kann

V: Versatzmaterial, nicht spezifiziert HS: heat spreader (Sand) BS: Breitspur

B: Bentonitpfropfen BP: Bentonitpellets NS: Normalspur

Bohrlochlagerung: Auswahl Vorzugsvariante für die Bohrlochlagerung

Variante 4



Gründe:

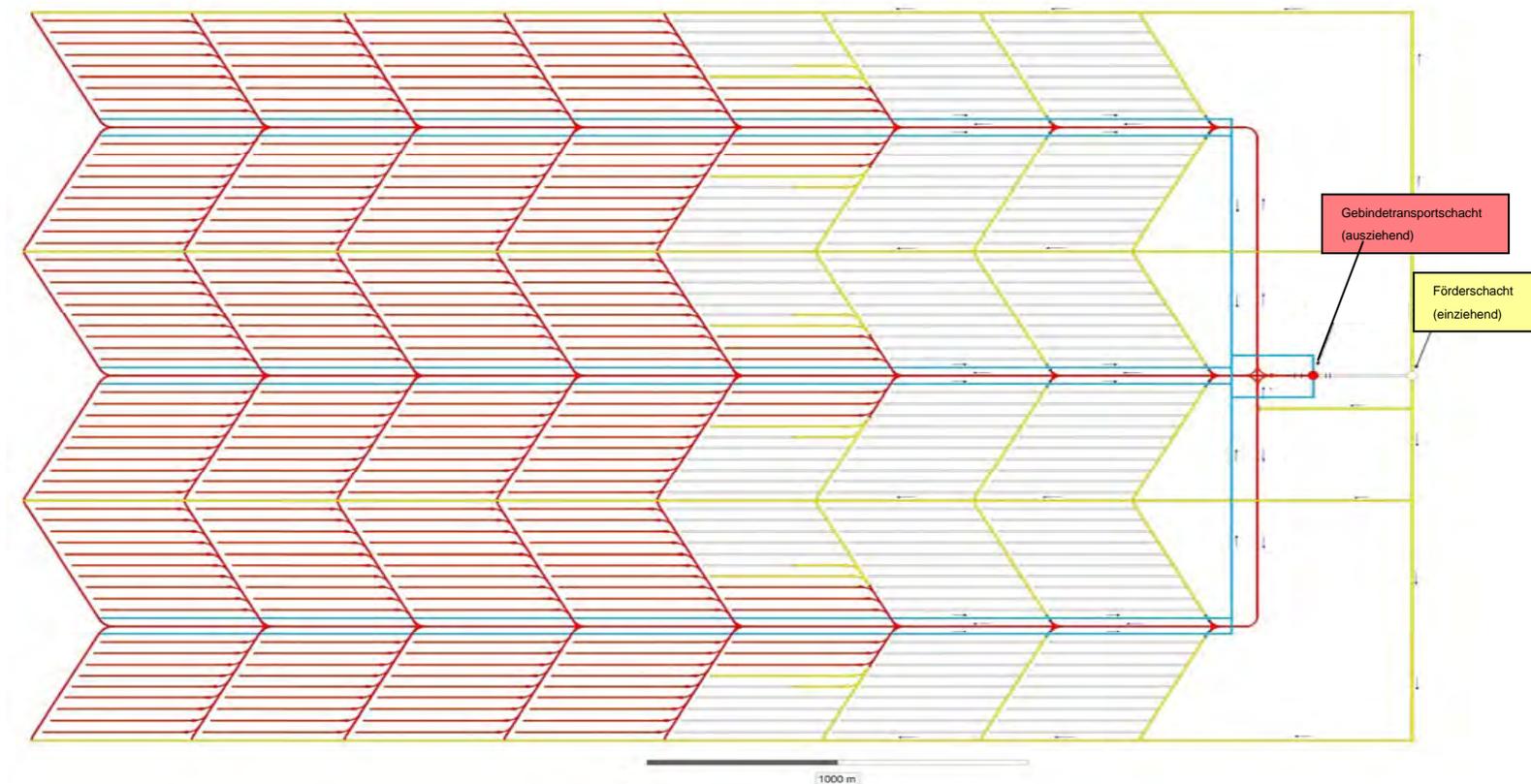
- Geringe Streckenquerschnitte (**ca. 50 m²**)
- Geringe Offenstandszeiten der Strecken (**ca. 2,3 Jahre** bei Streckenlänge von ca. 400 m (40 Gebinde))
- Geringe Massen (**51,4 t** für beladenen Transferbehälter)
- Geringe Spurweite und Gleisradien (**ca. 2 m** und **25 m**)

Randbedingungen für Grubengebäudeplanung

- Abfallmengengerüst gemäß Ausstiegsszenario
 - Brennelemente: 6818 POLLUX-3 BE/oder BSK 3
 - HAW: 3767 Kokillen
 - CSD-C: 6902 Kokillen
 - CSD-B: 560 Kokillen
- Einsöhlige Ausrichtung des Endlagers
- Trennung Grubengebäude in Überwachungs- (ÜB) und Kontrollbereich (KB)
- Auffahraktivitäten im ÜB und Einlagerung im KB
- Zentrale Schachtanlage mit 2 Schächten:
 - Frischwetterschacht (ÜB): Förderschacht für Haufwerk sowie Personal- und Materialtransport
 - Abwetterschacht (KB): Gebindetransportschacht
- Ermöglichung einer rückbauartigen Einlagerung von den Grubenfeldgrenzen zu den Schächten hin mit Abwurf bereits belegter Einlagerungsfelder
- Anordnung Einlagerungsfelder zwischen Richtstrecken (Erkundung)

== Bewertung + Auswahl Referenzkonzept ==

Grubengebäudeplanung - Streckenlagerung (6818 POLLUX-3BE)



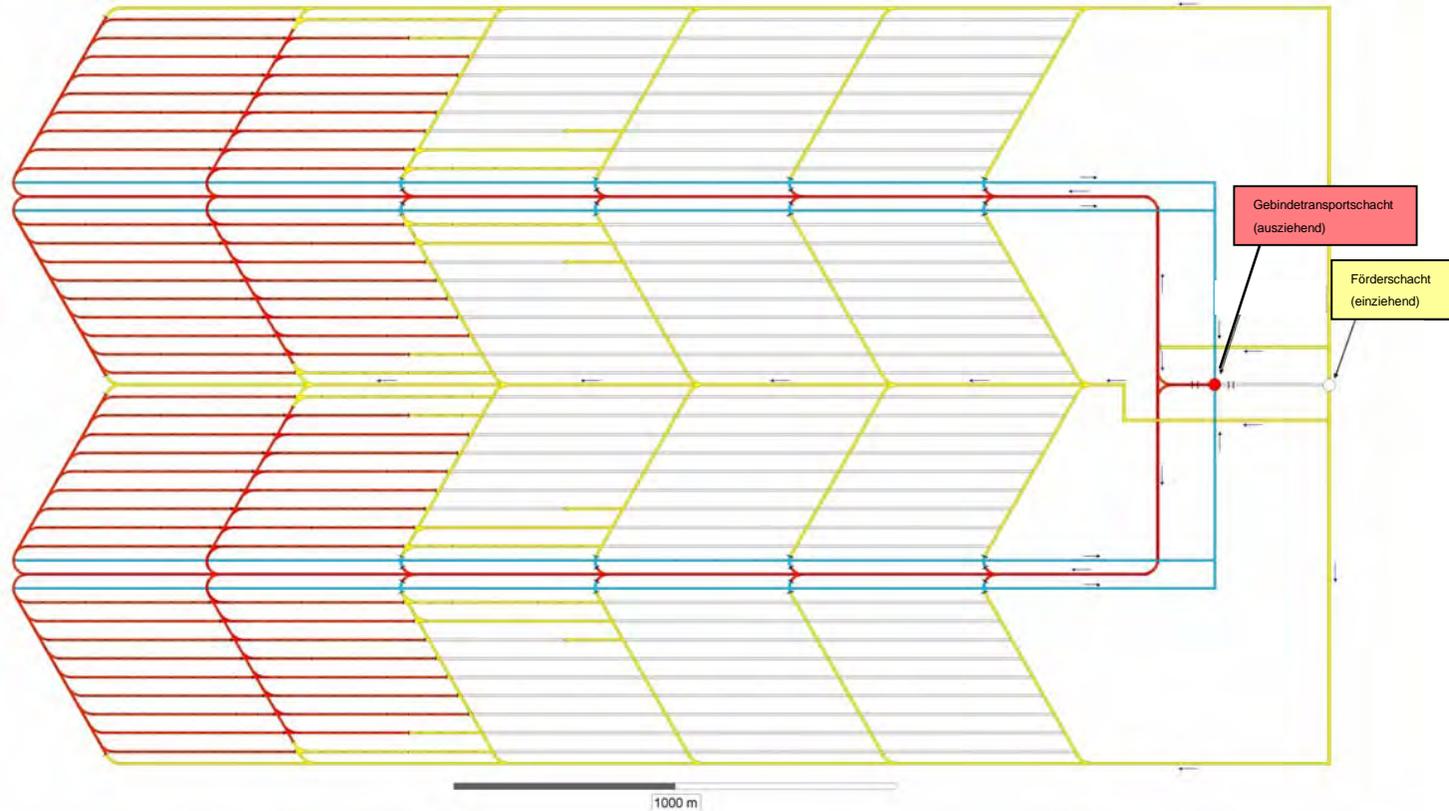
Flächenbedarf: ca. 6,9 km²

Streckenlänge: ca. 210 km

Gebindespezifisches Ausbruchvolumen: ca. 700 m³/Gebinde

== Bewertung + Auswahl Referenzkonzept ==

Grubengebäudeplanung - Bohrlochlagerung (6818 BSK3)

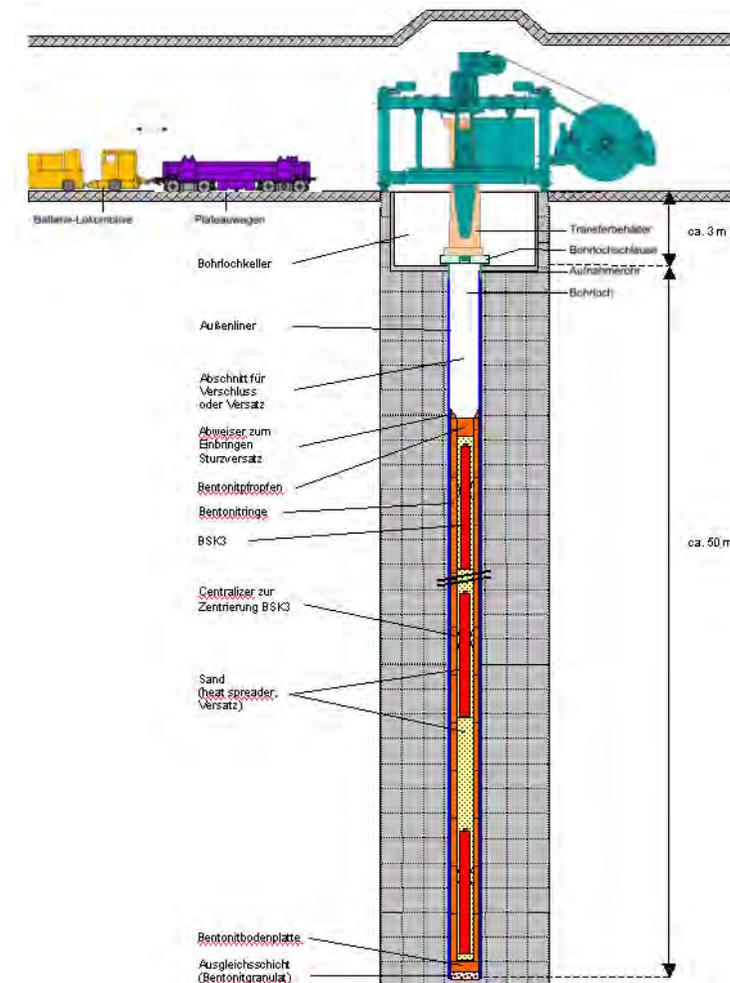


Flächenbedarf: ca. 3,8 km²
Streckenlänge: ca. 100 km
Gebindespezifisches Ausbruchvolumen: ca. 740 m³/Gebinde

Vorzugsvariante für die Einlagerung ausgedienter Brennelemente: Bohrlochlagerung (Variante 4)

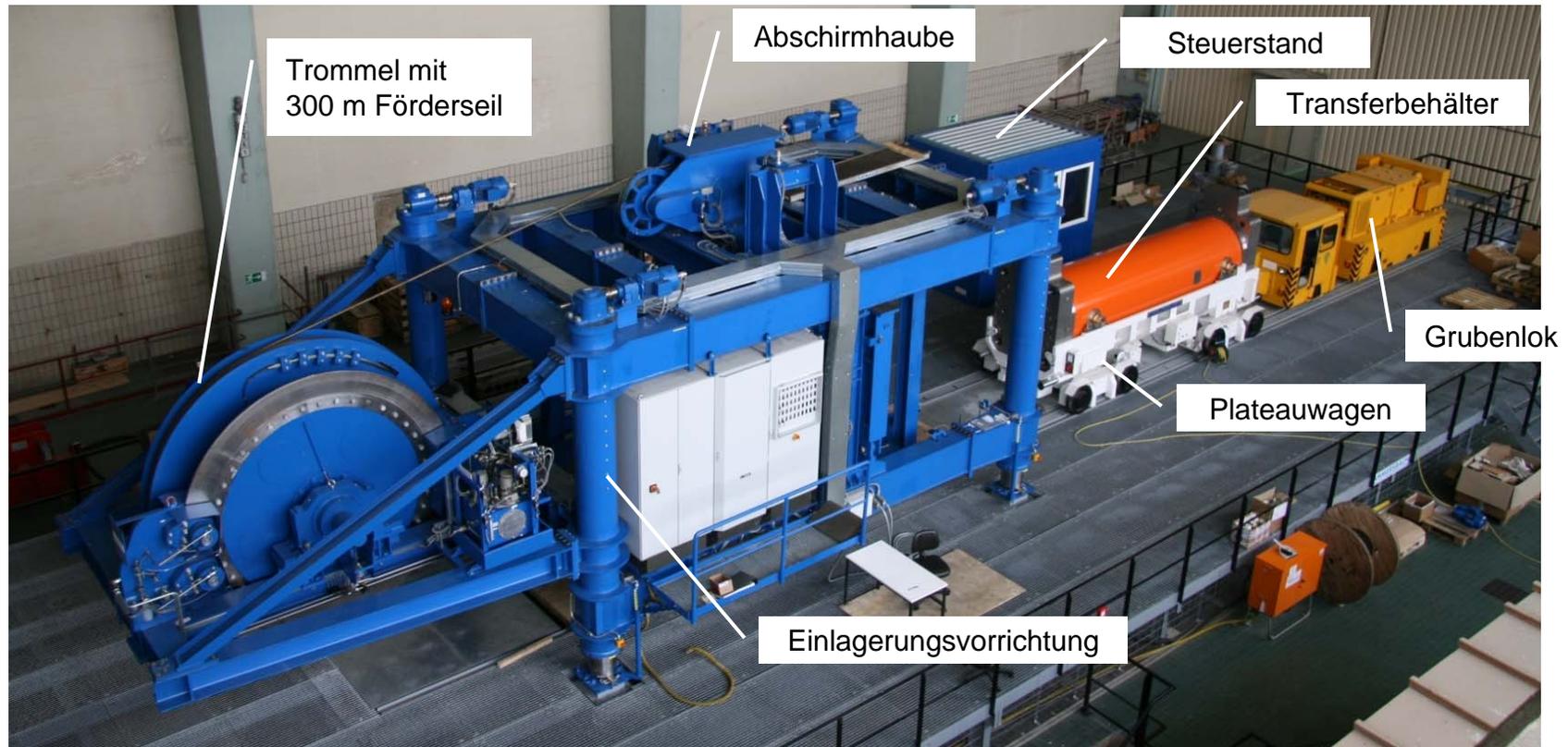
Gründe:

- **Geringerer Flächenbedarf**
(ca. 3,8 km² statt 6,9 km²)
- **Geringere Streckenlängen**
(ca. 100 km statt 210 km²)
- **Geringere Massen der Transporteinheiten**
(ca. 51 t statt 86 t)
- **Geringerer Stahlaufwand**
(Wasserstoffbildung durch Korrosion)
(ca. 7 t statt 54 t)
- **Gebirgsverbundene Einbettung von BSK3 und Bentonitbarriere**



== Bewertung + Auswahl Referenzkonzept ==

Versuchsstand zur Demonstration der Bohrlochlagerung von Brennstabkokillen



Herstellung Grubenbaue

Streckenauffahrung:

Querschnittsform: bogenförmig

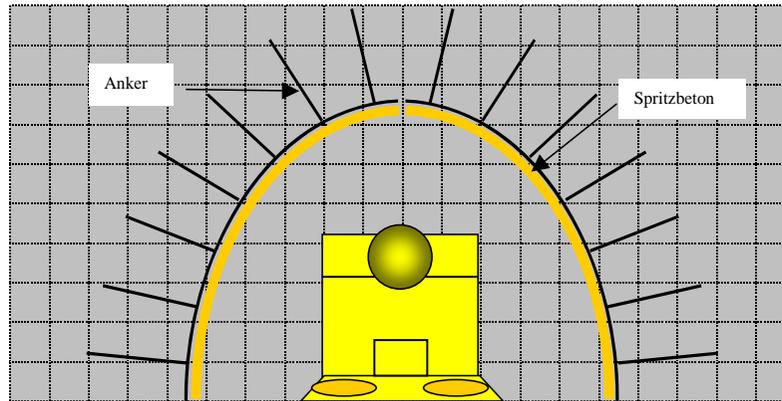


MT 300 der Fa. Sandvik Mining and Construction Central Europe GmbH

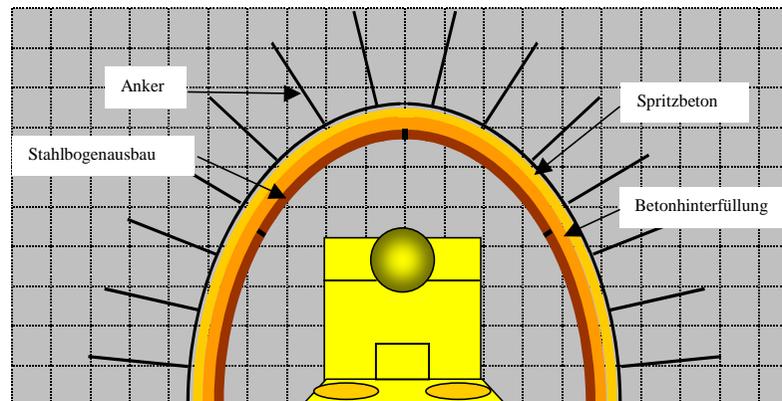
Herstellung Grubenbaue

Streckenausbau:

kurzlebige Strecken: Anker-Spritzbeton-Ausbau



langlebige Strecken: Anker-Spritzbeton-Ausbau mit Stahlbogenausbau und Betonhinterfüllung



Herstellung Grubenbaue

Streckenausbau:

Spritzbetonmanipulator Meyco Oruga



Ausbaumanipulator/-bühne GTA

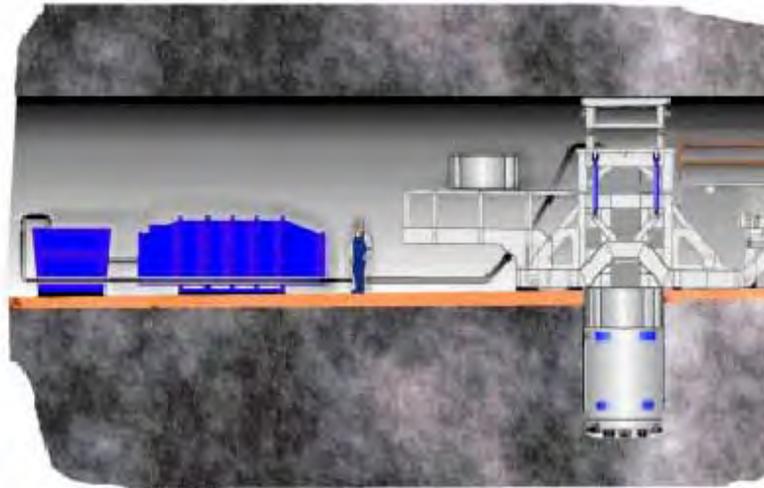


Herstellung Grubenbaue

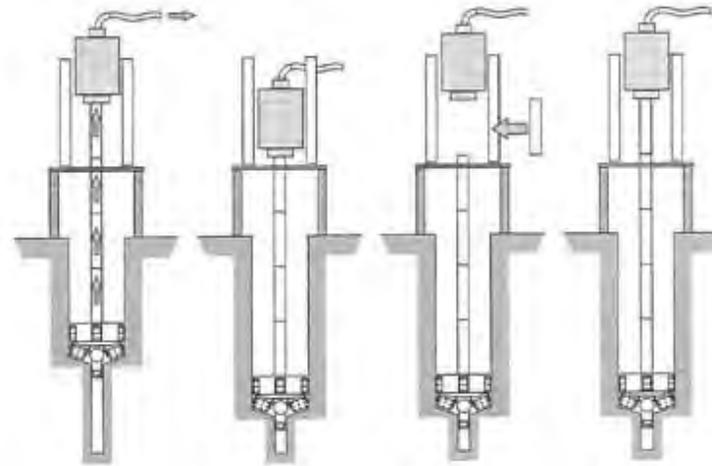
Einlagerungsbohrlöcher: Erfahrungen aus Untertagelabor Äspö (Schweden) in Granitformation

Pneumatische Bohrkleinabförderung mit indirekter Spülung und Absaugung für Herstellung Einlagerungsbohrlöcher (T = 9 m, D = 1,75 m)

Robbins SBM 1.8



Reverse Raise Boring



Bohren

Stopp

Verlängern
Gestänge

Bohren

Herstellung Grubenbaue

Bohrlochkeller: Erfahrungen aus Salzbergbau

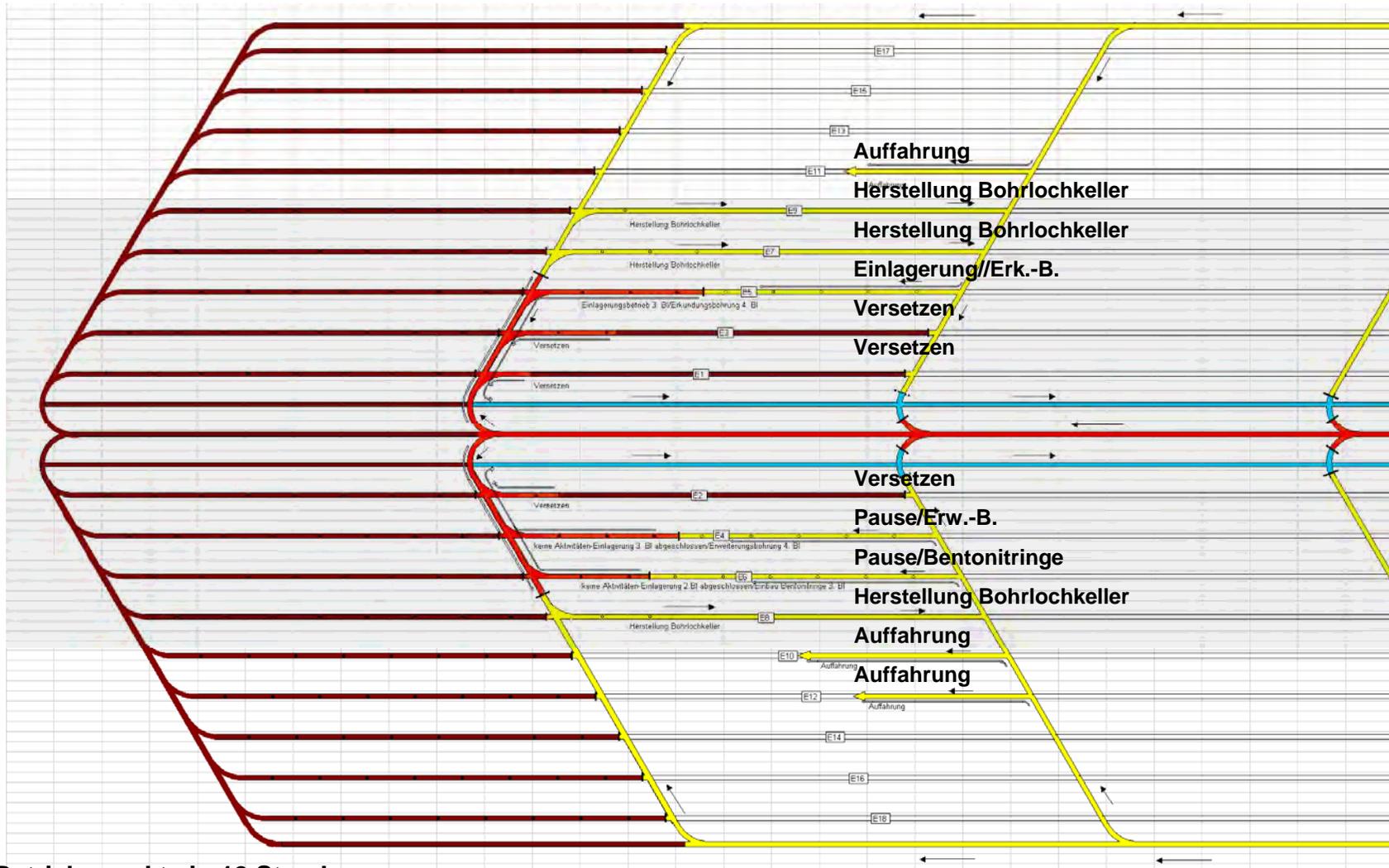


Kettenschrämmaschine - Korfmann Schrämmaschine HSTK 60 NS

Herstellung Grubenbaue

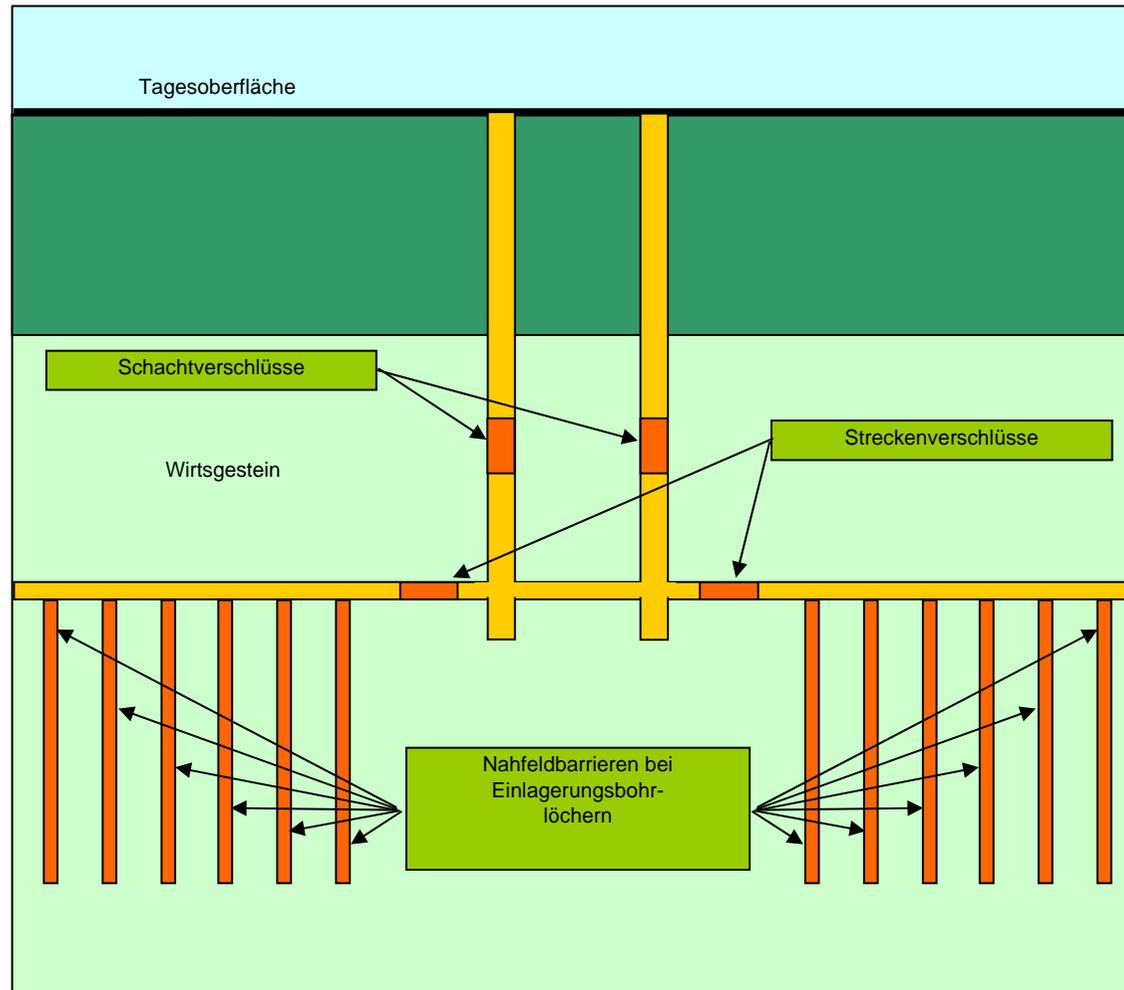
Einlagerungsfortschritt 0,5 BSK3/AT:

Bei Herstellung, Erkundungs-, Erweiterungsbohrungen + Einbau Bentonitrings in 3 Strecken



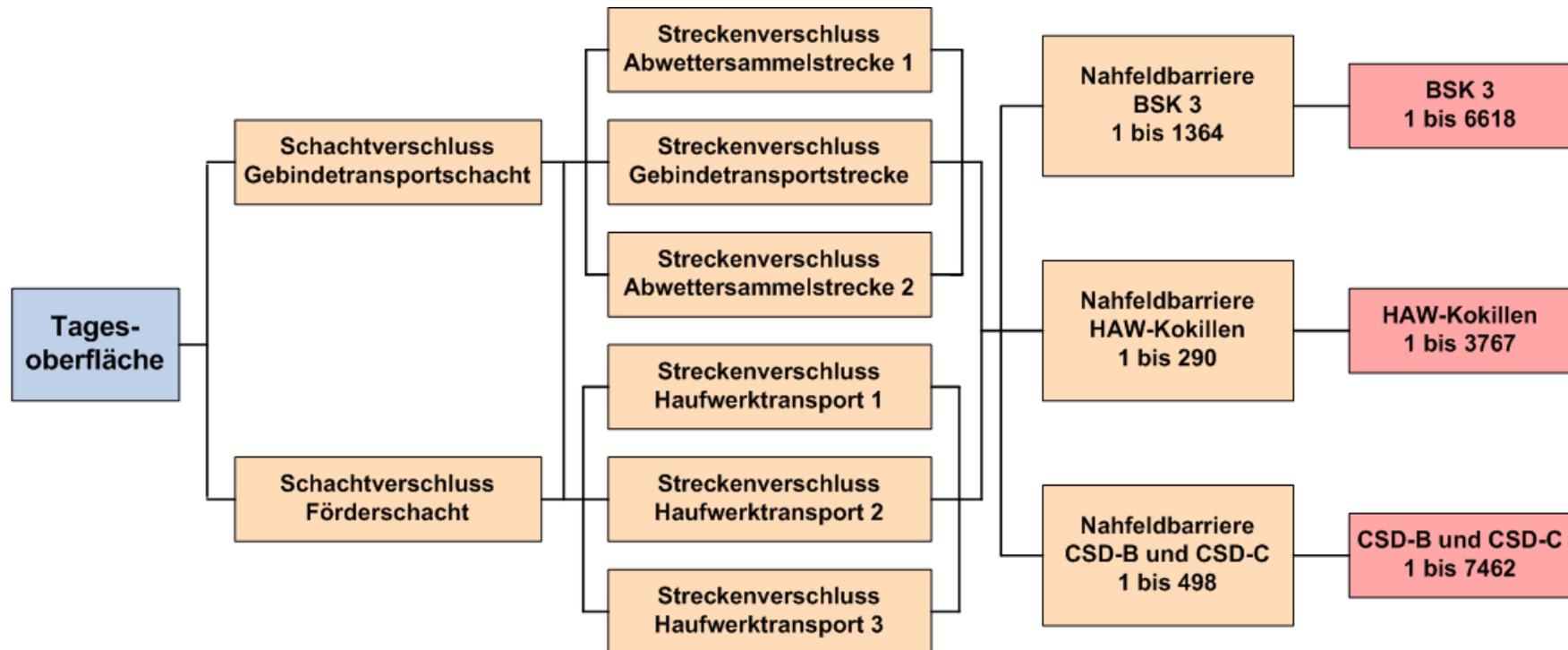
13 Betriebspunkte in 12 Strecken

Verschlusskonzept



Schematische Darstellung des Verschlusskonzeptes

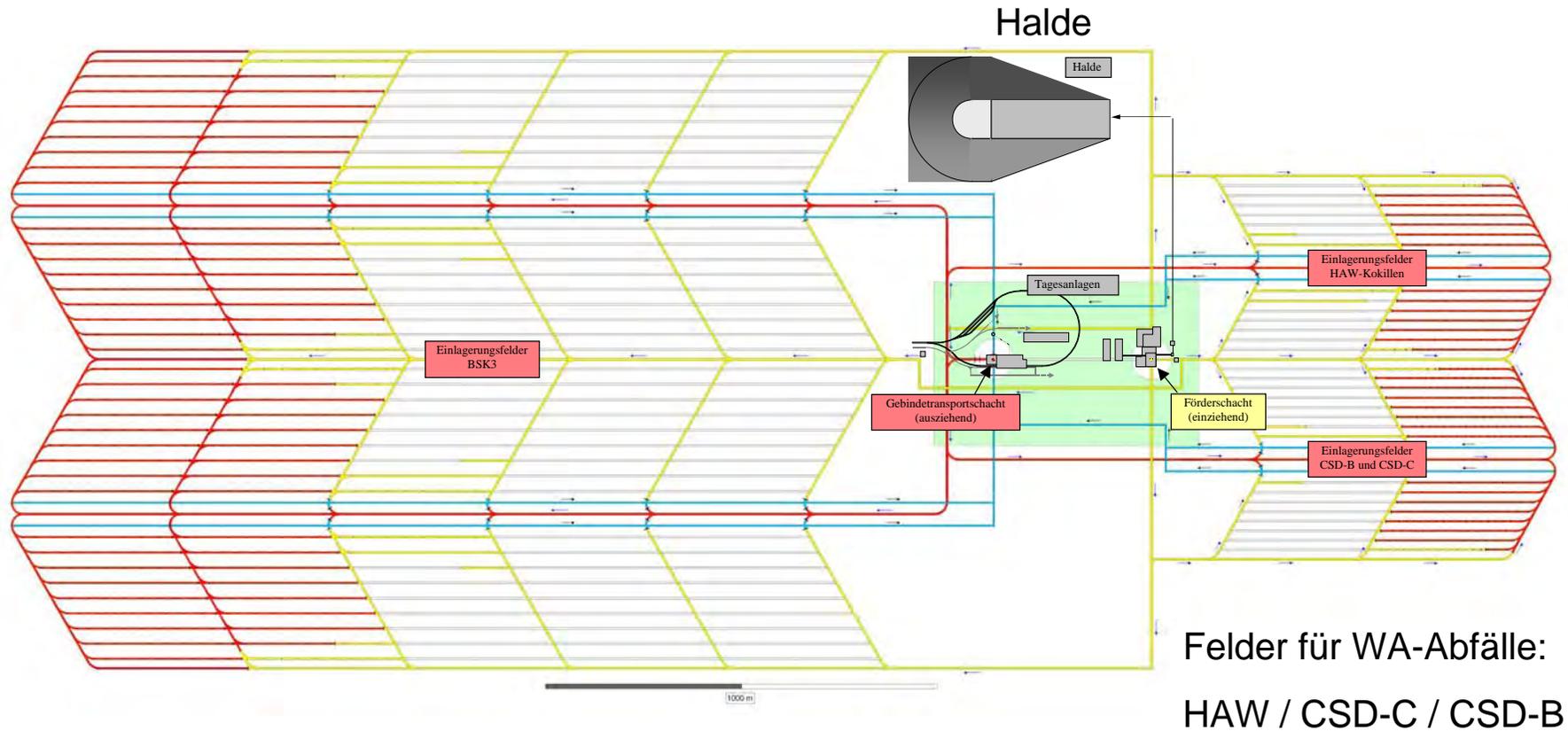
Verschlusskonzept



Schematische Darstellung des Verschlusskonzeptes im Detail

Zusammenfassung und Ausblick

Grundriss HAW-Endlager in Tonstein: Grubengebäude, Tagesanlagen u. Halde



Felder für ausgediente Brennelemente in BSK3

**Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen
Formationen: 9. Projektstatusgespräch**

**Untersuchungen zum THM-Verhalten von Steinsalz und Tonstein mit
Schwerpunkt EDZ**

Klaus Wieczorek, Oliver Czaikowski, Chun-Liang Zhang

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH

1 Einleitung

Salz- und Tongestein zeichnen sich gegenüber Kristallin durch eine ausgeprägte zeitabhängige Verformung aus. Deviatorische Spannungen, wie sie beispielsweise bei der Auffahrung von Hohlräumen entstehen, können dadurch schädigungsarm abgebaut werden; darüberhinaus erfolgt bei entsprechenden (kompressiven) Spannungszuständen langfristig eine Rekompaktion oder sogar Verheilung von geschädigten Bereichen.

Steinsalz und Tonstein besitzen im Naturzustand eine außerordentlich geringe Permeabilität (typisch 10^{-20} m² oder geringer). Die Permeabilität geschädigter Bereiche, die um mehrere Größenordnungen höher liegen kann, nimmt langfristig auf Grund von Rekompaktion/Verheilung ab. Dies sind wesentliche Gründe dafür, dass diese Gesteinstypen weltweit als für den Bau von Endlagern geeignet angesehen werden.

Bei vernachlässigbarem Porendruck (dies ist der Regelfall bei trockenem Steinsalz) werden zeitabhängige Verformungen ausschließlich durch den mechanischen Spannungszustand bestimmt, deviatorische Spannungen führen zu Kriechverformung bzw., im Fall der Überschreitung der Dilatanzgrenze, zu Mikrorissbildung und Porenraumvergrößerung sowie bei Überschreiten der Bruchfestigkeit zu Makrorissen; Spannungszustände unterhalb der Dilatanzgrenze führen zu Rekompaktion von aufgelockertem Gestein. Bei erhöhtem Porendruck, wie dieser beim im ungestörten Zustand wassergesättigten Tonstein auftritt, geht der Porendruck in den Gesamtspannungszustand ein. Damit kann es auch ohne Änderung des mechanischen Spannungszustandes zu zeitabhängiger Verformung in Folge von Porendruckänderungen kommen. Darüberhinaus

wird es im Nahbereich von Hohlräumen zu Teilentsättigung kommen. Durch diese werden unabhängig von einer mechanischen Schädigung die hydraulischen Eigenschaften des Gesteins verändert.

Die bei der Auffahrung von Hohlräumen in ihrem Nahbereich entstehenden Auflockerungszonen und ihre zeitliche Entwicklung sind insbesondere im Hinblick auf die Wirksamkeit geotechnischer Barrieren wie Bohrloch-, Strecken- und Schachtverschlüsse bedeutsam. Aus diesem Grund werden Auflockerungszonen im Steinsalz bereits seit mehreren Jahrzehnten untersucht, auch im Ton wurden entsprechende Untersuchungen inzwischen intensiviert. 2003 wurde von der Kommission der Europäischen Gemeinschaft eine „Cluster Conference and Workshop“ /CEC 03/ initiiert, bei der der aktuelle Stand der Forschung in den verschiedenen Wirtsgesteinen dokumentiert und eine Begriffsbestimmung durchgeführt wurde:

“The *excavation disturbed zone* is characterized by a change of stress relative to the initial state. Its outer boundary is not clearly delimited. In the interior part of the excavation disturbed zone close to the excavation, a zone with rock properties considerably changed by micro-fracturing exists. This is the *excavation damaged zone* (EDZ) which, in contrast to the rest of the excavation disturbed zone, exhibits significantly changed hydraulic properties.”

Im Fachbereich Endlagersicherheitsforschung wurden bzw. werden in den letzten Jahren mehrere Projekte zum Thema EDZ und zeitabhängige Verformung in Steinsalz und Tonstein durchgeführt. Zwei von ihnen, das EU-Projekt THERESA, dessen Schwerpunkt die Modellierung der Dilatanz und Rekompaktion von Steinsalz war und das Ende 2009 abgeschlossen wurde, und das Projekt THM-Ton, das unter anderem verschiedene In-situ-Untersuchungen im Untertagelabor Mont Terri mit zugehörigen Modellrechnungen beinhaltet, sollen hier vorgestellt werden.

2 EDZ im Steinsalz – Ergebnisse des Projekts THERESA

2.1 Projektstruktur und Einordnung

Das THERESA-Projekt wurde Anfang 2007 als EU-gefördertes STREP (Specific Targeted Research Project) mit dem Ziel gestartet, die Modellierungsfähigkeiten von kon-

stitutiven Modellen und Rechenprogrammen zur Analyse gekoppelter THMC-Prozesse zu prüfen und zu verbessern. Arbeitspaket 3 des Projekts beschäftigte sich mit dieser Aufgabe im Hinblick auf das Wirtsgestein Steinsalz, mit dem Schwerpunkt auf dem Einfluss von thermisch-hydraulisch-mechanischen (THM) Prozessen auf die Langzeitentwicklung der EDZ.

Neben der GRS als Koordinator dieses Arbeitspakets waren aus Deutschland die Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), die DBE Technology GmbH (DBE TEC), das Forschungszentrum Karlsruhe (FZK), das Institut für Gebirgsmechanik (IfG) und die Technische Universität Clausthal (TUC) daran beteiligt, außerdem das spanische Centre International de Méthodes Numériques en Ingeniería (CIMNE) und die niederländische Nuclear Research and Consultancy Group (NRG) mit dem Auftragnehmer Universität Utrecht (UU).

Das Arbeitsprogramm umfasste folgende Punkte:

- Feststellung der Fähigkeiten und/oder des Entwicklungsbedarfs der von den Partnern eingesetzten numerischen Simulationsprogramme und Zusammenstellung von für die Modellkalibrierung bzw. –verbesserung relevanten Daten
- Implementierung der kalibrierten/verbesserten Modelle in den Programmen und Test der Modelle
- Definition, Durchführung und Benchmark-Modellierung eines THM-Laborversuchs
- Integration der Ergebnisse der Prozesslevel-Programme in ein Programm zur integrierten Sicherheitsanalyse (Total System Performance Assessment, TSPA) und Berechnung eines Endlager-Referenzfalles

Die in dem Projekt durchgeführten FuE-Arbeiten sind im „Förderkonzept des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie - Schwerpunkte zukünftiger FuE-Arbeiten bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle (2007-2010)“, Stand: Dezember 2007 folgendem Themenbereich zugeordnet:

- B: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern
– B4: Verhalten von geotechnischen Barrieren - Modellierung des Langzeitverhaltens von Abschlussbauwerken bzw. deren Komponenten

2.2 Ergebnisse

Die Projektergebnisse sind in den jeweiligen Deliverables (/WIE 07/, /WIE 08/, /ZHA 09/, /WIE 09a/, /WIE 09b/) dokumentiert, es folgt eine kurze Zusammenfassung.

2.2.1 Modelle und Kalibrierung

Die meisten in THERESA eingesetzten Prozessmodelle basieren auf der Betrachtung des Gesteins als Kontinuum und auf dem Dilatanzkonzept, das Schädigung und Rekompaktion durch Zunahme bzw. Abnahme der Porosität beschreibt. Alle diese Modelle betrachten elastische Deformation und Kriechverhalten des Steinsalzes in ähnlicher Weise, unterscheiden sich jedoch in der Formulierung zur Berechnung der Volumendehnung sowie in der Berechnung der Permeabilität aus Porosität und ggf. Spannungszustand.

Insgesamt wurden fünf Formulierungen zur Berechnung von Dilatanz/Rekompaktion eingesetzt: BGR, CIMNE, FZK, IfG und TUC verwendeten jeweils eigene Ansätze, DBE TEC implementierte die von FZK und CIMNE.

Vier verschiedene Ansätze zur Permeabilitätsberechnung wurden benutzt. BGR, FZK, IfG und DBE TEC setzten die gleiche Formulierung ein, bei der die Permeabilität als Funktion von Porosität und minimaler Hauptspannung berechnet wird. TUC verwendete einen Ansatz für die Permeabilität als Funktion von Dilatanz (Sekundärporosität) und minimaler Hauptspannung. CIMNE untersuchte zwei Permeabilitäts-Porositätsbeziehungen, eine vom Kozeny-Typ und eine, bei denen Mikrorisse durch eine Öffnungsweite und einen konstanten Abstand zueinander simuliert werden.

DBE TEC betrachtete zusätzlich das Programm PFC^{3D}, das auf der Discrete-Element-Methode beruht, in der das Steinsalz als Aggregat einzelner Teilchen betrachtet wird und nicht als Kontinuum. Allerdings zeigte sich bei der Kalibrierung, dass das komplexe Verhalten des Steinsalzes durch die in diesem Programm angebotenen Materialeigenschaften nicht realistisch modelliert werden kann; außerdem reichte die vorhandene Rechenleistung für eine angemessene Diskretisierung nicht aus.

NRGs Modell basierte nicht auf dem Dilatanzkonzept, sondern auf mikrophysikalischen Modellen zur Rissschließung und Verheilung, die aus experimentellen Untersuchungen

von UU entwickelt wurden. Allerdings ist mit diesen Modellen die Mikrorissbildung nicht simulierbar.

Um die vorhandene Datenbasis zur Kalibrierung der Modelle zu erweitern, wurden von GRS mehrere Triaxialversuche an Steinsalzproben durchgeführt, bei denen die Volumendeformation und die Gaspermeabilität unter wechselnden Spannungsbedingungen gemessen wurden. Obwohl es im Verlauf der Kalibrierphase teilweise zu numerischen Problemen kam, waren bei Beginn des Benchmarkversuchs alle auf dem Dilatanzkonzept beruhenden Modelle soweit kalibriert, das die Projektpartner sich in der Lage fühlten, den Benchmarktest zu simulieren. Ein Beispiel zur Kalibrierung zeigt Abb. 1.

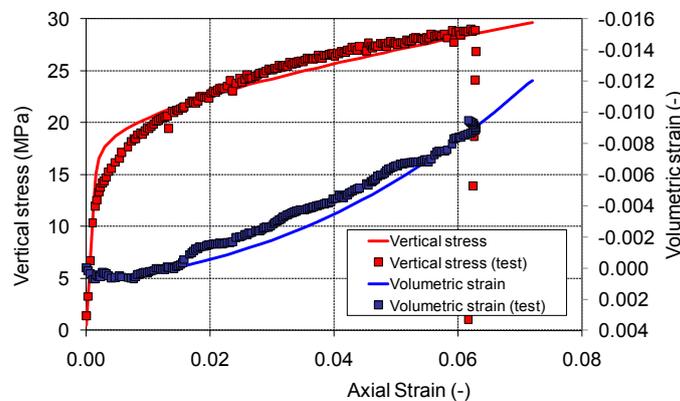


Abb. 1 Entwicklung von Axialspannung und Volumendehnung einer Steinsalzprobe als Funktion der Axialverformung, gemessen (GRS) und berechnet (CIMNE) /WIE 09b/

2.2.2 Benchmark-Versuch

Um die Eignung der kalibrierten Modelle zur Berechnung von EDZ-Entwicklung und – Rekompaktion nachzuweisen, wurde ein Benchmark-Laborversuch geplant und im GRS-Labor durchgeführt. Ursprünglich sollte ein großer axial-gelochter Salzzylinder von 280 mm Durchmesser und 525 mm Länge in der großen Triaxialapparatur eingesetzt werden. Allerdings führten apparative Beschränkungen dazu, dass eine Permeabilitäts-erhöhung erst erreicht wurde, als die Axialbohrung mit Druck beaufschlagt wurde. Als Folge wurde ein Dehnungsriss produziert, der für die in der EDZ erwarteten Mikrorisse nicht repräsentativ ist. Aus diesem Grund wurden parallel durchgeführte Versuche mit normalgroßen Salzproben ohne Bohrung für die Benchmarksimulation herangezogen. Der Messaufbau ist in Abb. 2 gezeigt.

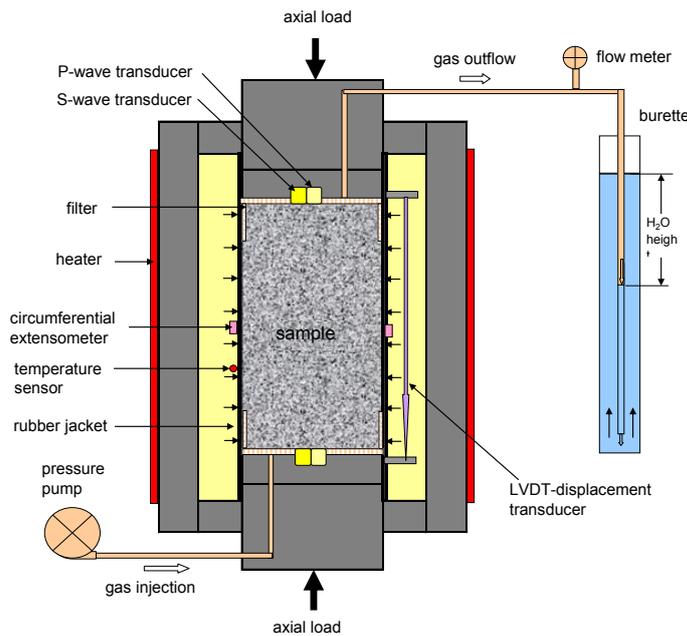


Abb. 2 Einbau der TC2-Probe in der Triaxialapparatur

Der Versuch wurde in zwei Schritten durchgeführt (TC2A und TC2B). Zunächst wurde die Probe zwei Belastungsstufen von 11 MPa und 19 MPa deviatorischer Spannung ausgesetzt (TC2A, Abb. 3). Danach wurde die Probe ausgebaut und auf Risse untersucht. Anschließend wurde die Probe wieder eingebaut und das Experiment wurde mit mehreren Belastungsstufen, einer Rekompaktionsphase und einer Phase erhöhter Temperatur fortgesetzt (TC2B). Die Belastungsstufen während TC2B zeigt Abb. 4; Abb. 5 zeigt die zugehörigen Verformungen und die Entwicklung der Pemeabilität.

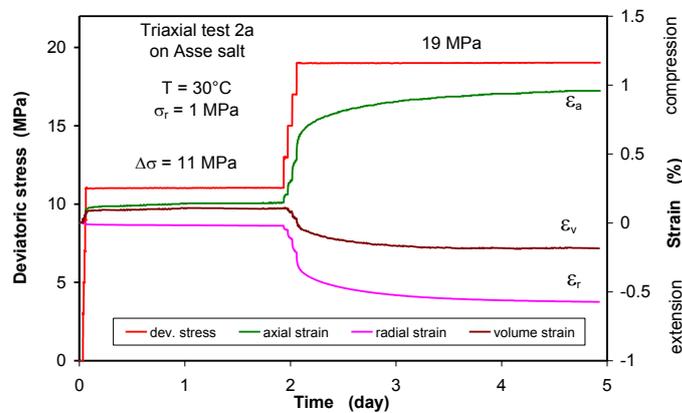


Abb. 3 Verformung der Probe während der ersten zwei Belastungsstufen (TC2A)

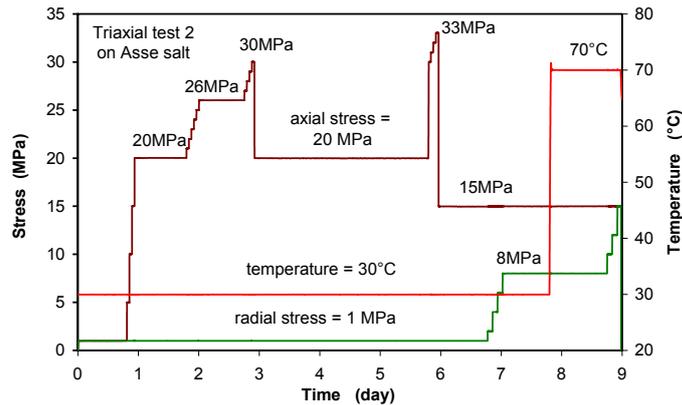


Abb. 4 Belastungsstufen in Phase TC2B

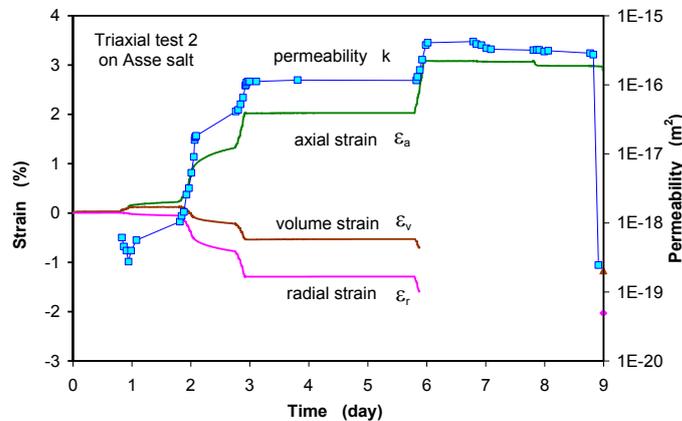


Abb. 5 Verformung und Permeabilität der Probe in Phase TC2B

Die Modellierungsteams erhielten die Daten von TC2A zur Überprüfung ihrer Parameter und die Belastungsstufen von TC2B zur Durchführung einer Prognoserechnung. Anschließend wurden die Messdaten von TC2B verteilt und eine Interpretationsrechnung durchgeführt. Es zeigte sich, dass für eine zufriedenstellende Übereinstimmung keine oder nur geringe Parameteranpassungen nötig waren. Ein Beispiel zeigt Abb. 6.

Obwohl die Ergebnisse insgesamt gesehen gut waren, zeigte sich, dass bei verschiedenen Teams Abweichungen von den Messungen in verschiedenen Phasen von TC2B auftraten.

Es zeigte sich auch, dass mit unterschiedlichen Ansätzen für die Permeabilitätsberechnung ähnlich gute Ergebnisse erreicht werden können, dass andererseits aber gleiche Ansätze für die Permeabilitätsberechnung nicht zu gleichen Ergebnissen führen müssen, selbst wenn die mechanische Berechnung ähnlich gut ist.

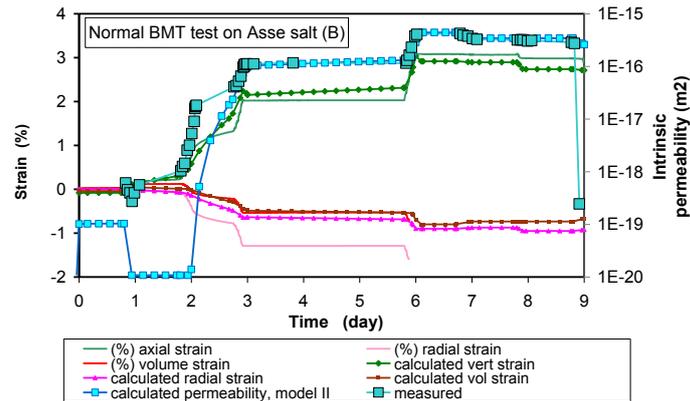


Abb. 6 CIMNEs Berechnungsergebnisse für Phase TC2B

2.2.3 Referenzfall-Berechnung mit LOPOS

Im letzten Schritt des Projekts wurde ein Referenzfall definiert, bei dem der Einfluss der EDZ-Entwicklung mit einem TSPA-Programm untersucht werden sollte. Anstatt dabei ein ganzes Endlager zu simulieren, wurde ein Modell eines Streckenverschlusses mit der umgebenden EDZ betrachtet, an den sich auf der einen Seite ein Schacht und auf der anderen Seite ein Einlagerungsfeld anschließt (Abb. 7). Die verschlossene Strecke befindet sich in 855 m Teufe, der Streckenquerschnitt beträgt 23 m² und das Verschlussmaterial ist Beton, der als rein elastisch betrachtet wird und eine konstante Permeabilität von 10⁻¹⁹ m² besitzt.

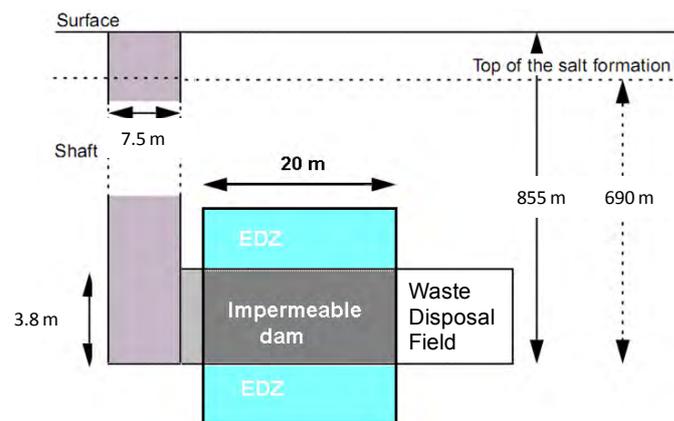


Abb. 7 Für die Rechnungen zum Referenzfall betrachtete Konfiguration

Als potentieller Zuflussweg für Lauge wird der Schacht betrachtet. Aus diesem Grund wurden folgende Rechenfälle definiert:

1. Trockene Entwicklung: Vor Einbringung des Streckenverschlusses wird der Streckenrand um 0.5 m rings um die Strecke nachgeschnitten, dann wird der Verschluss eingebaut. Das Gebirge läuft auf den Verschluss auf und die EDZ wird mit der Zeit rekompaktiert, die Permeabilität verringert sich.
2. Wie 1, aber nach 50 Jahren versagt der Schachtverschluss, und Lauge steht unter hydrostatischem Druck auf einer Seite des Verschlusses an.
3. Wie 2, aber die Lauge steht unmittelbar nach Einbau des Streckenverschlusses an (um die Effektivität des Streckenverschlusses allein zu bestimmen).
4. Zusätzliche Fälle 4.1 – 4.3 wie 1 – 3, jedoch ohne vorherigen Nachschnitt der Streckenkontur, d. h. die volle EDZ wird wirksam.

Es wurde erstmalig eine zeitlich veränderliche Permeabilität in einem TSPA Programm implementiert, und zwar in dem EMOS-Modul LOPOS. Für die geplanten Simulationen mit LOPOS war der zeitliche Verlauf der Permeabilität als Eingabe erforderlich, musste also zuerst durch entsprechende Prozesslevel-Berechnungen ermittelt werden. Dabei wurde folgendermaßen vorgegangen:

- Zunächst wurde für zwei Berechnungsfälle die mechanische Entwicklung des Systems Strecke bzw. Verschluss / EDZ / Salzgebirge in einem zweidimensionalen Plane-Strain-Modell mit CODE_BRIGTH berechnet. Dabei wurde zunächst eine 30 Jahre offenstehende Strecke simuliert, anschließend in einem der Fälle die Streckenkontur nachgeschnitten, 6 Monate später in beiden Fällen der Verschluss (Beton) eingebaut und die weitere mechanische Entwicklung über 10 000 Jahre modelliert. Dabei kamen die Modellparameter zum Einsatz, die von CIMNE für den Benchmark-Laborversuch ermittelt worden waren. Allerdings zeigte sich, dass mit diesen Parametern nur eine sehr geringe Dilatanz auftrat, die nicht mit In-situ-Beobachtungen im Einklang stand. Aus Konservativitätsgründen wurden die Parameter so modifiziert, dass eine für dieses Modell maximale Dilatanz auftrat.
- Das Ergebnis der beiden Berechnungsfälle war jeweils eine Porositätsverteilung um die Strecke für verschiedene Zeitpunkte. Es wurde eine Reihe von Porositätsklassen festgelegt und für jeden Zeitpunkt die zu jeder Porositätsklasse gehörende Querschnittsfläche bestimmt.
- Die Porositätsklassen wurden über verschiedene Permeabilitäts-Porositäts-Relationen (nach Olivella, Zhang, Kozeny, siehe /WIE 09b/ in Permeabilitätsklas-

sen überführt und für jeden Zeitpunkt die Produkte aus Klassenpermeabilität und zugehöriger Querschnittsfläche aufsummiert.

- Da die Darcy-Gleichung für den Fluss in einem porösen Medium linear in Permeabilität und durchströmter Fläche ist, kann man für eine festgelegte äquivalente Querschnittsfläche die äquivalente Permeabilität bestimmen. Um zum gleichen Fluss zu führen, muss das Produkt aus äquivalenter Flächen und äquivalenter Permeabilität gleich der Produktsumme aus dem vorigen Punkt sein. Als äquivalente Fläche wurde ein Wert von 23 m^2 gewählt (ursprünglicher Streckenquerschnitt), um die äquivalente EDZ-Permeabilität direkt mit der Verschlusspermeabilität vergleichen zu können.
- Aus den mit den verschiedenen Permeabilitäts-Porositäts-Relationen ermittelten äquivalenten Permeabilitätsverläufen wurde die nach Olivella als konservative Relation für die Implementation in LOPOS ausgewählt.
- Zur Bestimmung der äquivalenten EDZ-Porosität wurde die gesamte Porenraumvergrößerung für jeden Zeitschritt gleichmäßig auf die äquivalente Querschnittsfläche von 23 m^2 verteilt.

Die so ermittelten Funktionen für äquivalente Permeabilität und Porosität wurden in das EDZ-Modul von LOPOS eingegeben und damit die oben definierten Fälle für eine Laugenzuritt direkt nach Verschlusseinbau bzw. 50 Jahre später berechnet.

Abbildung 8 zeigt die EDZ-Permeabilitätsentwicklung ab dem Zeitpunkt des Laugenzutritts. Da im Fall eines Zutritts 50 Jahre nach Verschlusseinbau die EDZ bereits leicht rekompaktiert ist, beginnen die entsprechenden Kurven bei etwas niedrigeren Werten. Deutlich zu sehen ist, dass bei Nachschnitt der Streckenkontur die EDZ-Permeabilität sehr viel schneller abnimmt als wenn die EDZ nicht durch Nachschnitt reduziert wird.

Die Fließraten (in m^3/a) durch EDZ und Streckenverschluss für die verschiedenen Fälle sind Abb.9 dargestellt. Erwartungsgemäß zeigt sich, dass die Fließraten in den Fällen mit Kontur-Nachschnitt sehr viel schneller abnehmen als bei nicht reduzierter EDZ.

Die Ergebnisse zeigen, dass die EDZ als Fließweg umso bedeutender ist, je eher ein Laugenzufluss auftritt, je geringer die Verschlusspermeabilität ist und insbesondere wenn die Streckenkontur nicht nachgeschnitten wird.

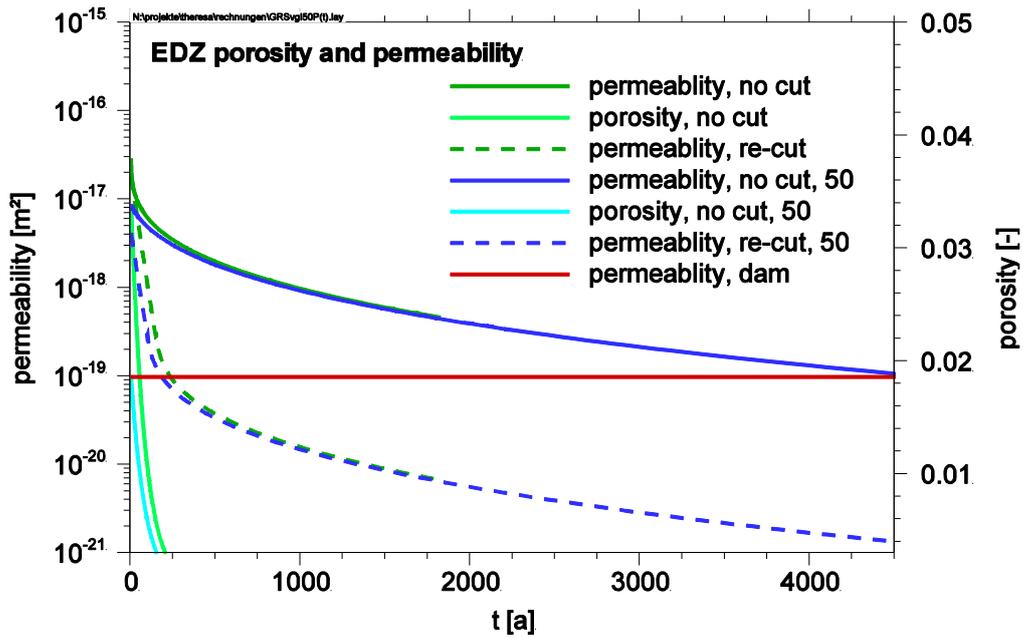


Abb. 8 Entwicklung der äquivalenten Permeabilität und Porosität der EDZ für die Fälle „Laugenzutritt bei Verschlusseinbau“ und „50 Jahre später“ („50“) bzw. „Kontur-Nachschnitt“ („re-cut“) und „ohne Nachschnitt“ („no cut“)

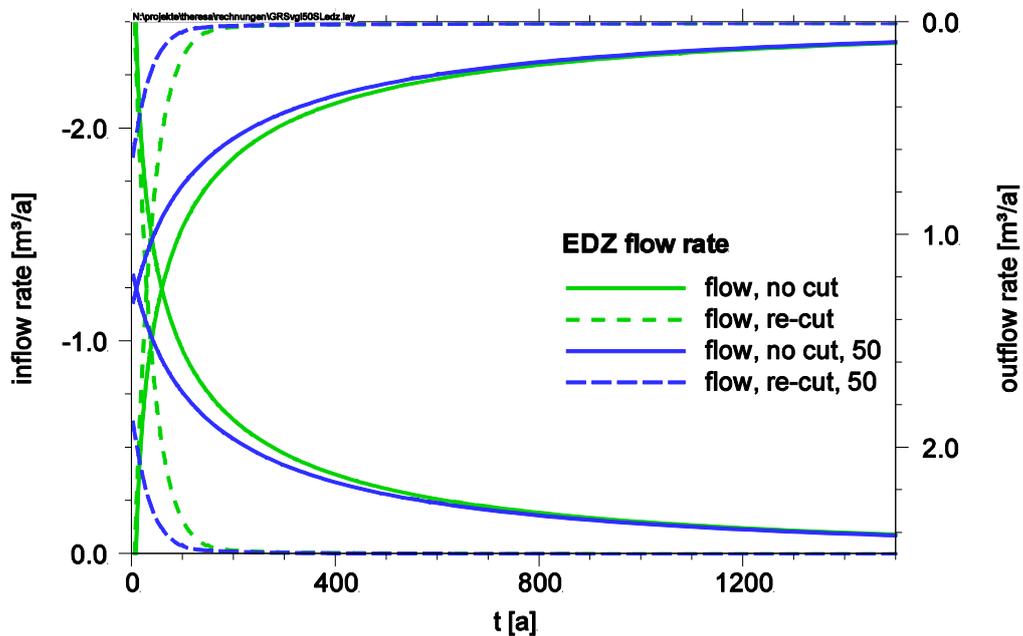


Abb. 9 Entwicklung der Fließrate in den Verschluss und die EDZ bzw. der Ausflussrate für die Fälle „Laugenzutritt bei Verschlusseinbau“ und „50 Jahre später“ („50“) bzw. „Kontur-Nachschnitt“ („re-cut“) und „ohne Nachschnitt“ („no cut“)

Die Berechnungsergebnisse sind insofern konservativ, als für die Berechnung der äquivalenten Permeabilitätsentwicklung bei der Prozesslevel-Rechnung Parameter verwendet wurden, die eine maximale Dilatanz erzeugen, und eine konservative Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung verwendet wurde. Allerdings kann man das in CODE_BRIGTH implementierte Dilatanzmodell noch nicht als hinreichend validiert betrachten. Außerdem wurde die Porositäts-/Permeabilitätsentwicklung für den trockenen Fall berechnet und anschließend für die Berechnung des Laugenflusses durch die EDZ eingesetzt. Tatsächlich hat eine Befeuchtung mit Lauge einen starken (beschleunigenden) Einfluss auf das Kompaktionsverhalten des Steinsalzes, andererseits kann eine Aufsättigung des Porenraums mit Lauge die weitere Kompaktion behindern. Zur Berücksichtigung dieser Phänomene sind weitere Modellentwicklung und Parameterbestimmung notwendig, die im Rahmen von THERESA nicht geleistet werden konnten.

2.3 Offene Fragen und geplante Weiterarbeit

Die Ergebnisse von THERESA wurden bei einem von den Projekten THERESA und TIMODAZ initiierten Workshop in Luxemburg im September/Oktober 2009 diskutiert und der Stand der Forschung zusammengefasst /ROT 09/. Die folgenden Feststellungen wurden getroffen:

- Die THM-Prozesse im Nahfeld und ihr Einfluss auf die EDZ werden verstanden und in vorhandenen Stoffmodellen angemessen wiedergegeben.
- Die vorhandene Datenbasis ist jedoch dünn und nicht ausreichend für die Absicherung der Modelle, die für den Langzeitnachweis der Verschlusswirksamkeit der geotechnischen Barriere erforderlich ist.
- Weitere Laboruntersuchungen sind erforderlich, insbesondere hinsichtlich der Rekompaktion der EDZ und ihr Zusammenwirken mit der technischen Barriere.
- Erste PA-Rechnungen im Rahmen von THERESA deuten an, dass eine hinreichende Rekompaktion der EDZ in maximal 3000 bis 4000 Jahren erreicht wird, wobei sich dieser Zeitraum durch technische Maßnahmen wie Konturnachschnitt deutlich verringern lässt. Allerdings leiden diese vorläufigen Ergebnisse an den bestehenden Unsicherheiten zum Langzeitverhalten der EDZ.

Entsprechend werden die folgenden weiterführenden Untersuchungen empfohlen:

- Weitere experimentelle Untersuchungen zum Langzeitkompaktionsverhalten bei mäßigen Spannungen sowie zum Einfluss von Feuchte und erhöhtem Porendruck auf das Rekompaktionsverhalten von geschädigtem Steinsalz zur Vervollständigung der Datenbasis für die Modellüberprüfung
- Weiterentwicklung und Validierung der Stoffmodelle einschließlich der Überprüfung ihrer Eignung für die Anwendung auf In-situ-Verhältnisse
- Implementierung der von umfassend kalibrierten Prozesslevel-Modellen ermittelten zeitabhängigen EDZ-Permeabilität in TSPA-Programme und Durchführung zuverlässiger Vorhersagen potentieller Laugenzuflüsse

3 THM-Verhalten von Tonstein – aktuelle Arbeiten im Projekt THM-Ton

3.1 Projektstruktur und Einordnung

Das Projekt THM-Ton (Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen) wird seit Mitte 2007 durchgeführt, um die Datenbasis zum THM-Verhalten des Tonsteins durch geeignete Experimente zu erweitern und vorhandene Modellvorstellungen und Untersuchungsmethoden weiter zu entwickeln und damit die Beschreibung und Berechenbarkeit des THM-Verhaltens von Tonstein zu verbessern. Das Arbeitsprogramm ist folgendermaßen gegliedert:

1. In-situ-Untersuchungen:
 - Untersuchung der hydraulischen Reaktion auf eine Tunnelauffahrung im Untertagelabor Mont Terri durch Messungen von Porenwasserdruck und Permeabilität im Rahmen des Mont Terri Mine-By Experiments, das unter Leitung der Nagra durchgeführt wird
 - Untersuchung des zeitabhängigen Verformungsverhaltens des Tonsteins in einem verschlossenen Bohrloch
2. Laborversuche an Tonstein zum Verformungsverhalten, zum Quellverhalten, zur Verheilung und zur Auswirkung erhöhter Temperatur auf das HM-Verhalten sowie Laborversuche an Tonversatz (Auffahrungsrückstand)
3. Modellierung der In-situ- und Laborexperimente

Die in dem Projekt durchgeführten FuE-Arbeiten sind im „Förderkonzept des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie - Schwerpunkte zukünftiger FuE-Arbeiten bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle (2007-2010)“, Stand: Dezember 2007 folgendem Themenbereich zugeordnet:

- B: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern
 - B2: Verhalten der Wirtsgesteinsformation: Untersuchung und Modellierung des geomechanischen, geochemischen und thermohydromechanischen Verhaltens von Steinsalz und Tonsteinen

3.2 Ausgewählte bisherige Ergebnisse

Der Schwerpunkt der Darstellung bisheriger Ergebnisse in diesem Papier liegt auf einer Auswahl von In-situ-Messergebnissen mit zugehöriger Modellierung.

3.2.1 Hydraulische Messungen im Rahmen einer Tunnelauffahrung und hydraulisch-mechanische Modellierung

Das Untertagelabor Mont Terri, das von einem internationalen Konsortium, zu dem die GRS gehört, betrieben wird, liegt im Schweizer Jura im Opalinuston, einem überkonsolidierten Tonstein (Abb. 10). Abbildung 11 zeigt einen Überblick des Untertagelabors mit den zu verschiedenen Zeitpunkten aufgefahrenen Hohlräumen.

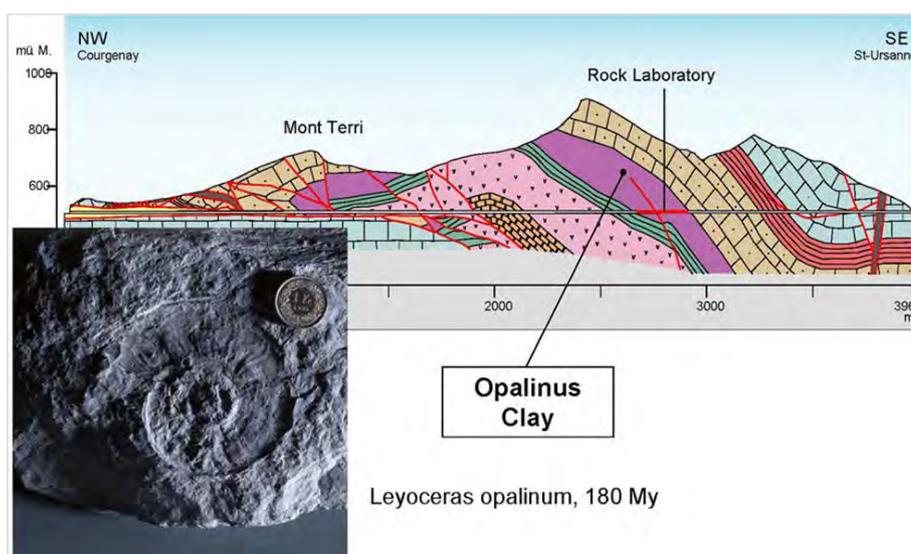


Abb. 10 Mont Terri: Geologischer Überblick

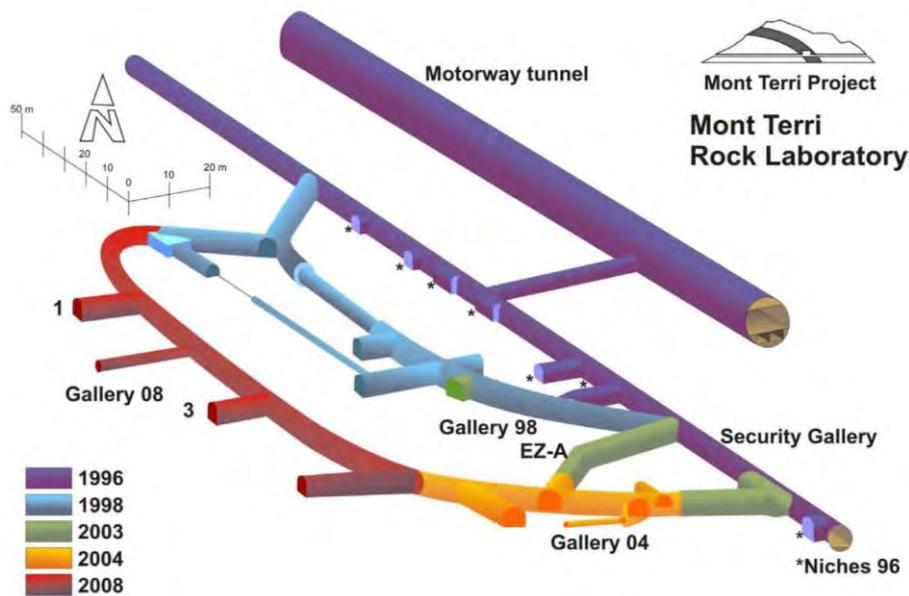


Abb. 11 Mont Terri Untertagelabor

Das Mine-By Experiment, in dessen Rahmen GRS einen Teil der hydraulischen Messungen übernommen hat, sollte nach ursprünglicher Planung im Zuge der Auffahrung der Gallery 08 erfolgen. Später wurde diese Planung aus Kostengründen revidiert, das eigentliche Mine-By Experiment wurde auf die Nische 2 (zwischen 1 und 3 in Abb. 11) beschränkt. Verschiedene Messungen wurden allerdings auch in Gallery 08 durchgeführt, insbesondere wurde im Rahmen des Mont Terri Projekts EZ-G der Anschlussbereich zwischen Gallery 04 und Gallery 08 während der Auffahrung untersucht. Infolgedessen konzentrieren sich die hydraulischen Messungen der GRS auf drei Bereiche (Abb. 12):

- Vier lange Bohrungen wurden vor Auffahrung der Gallery 08 in deren Richtung bzw. in den Bereich unterhalb des Pfeilers gestoßen und mit Minipackersonden und Temperatursensoren bestückt.
- Drei Bohrungen mit Minipackersonden und Temperatursensoren befinden sich im Anschlussbereich zwischen Gallery 04 und Gallery 08 und registrierten Porenwasserdruck und Temperatur während der Auffahrung (in Abb. 12 mit EZ-G bezeichnet).
- Vier Bohrungen wurden nach Auffahrung der Gallery 08 im Bereich der Nische 2 gestoßen und registrierten Porenwasserdruck und Temperatur während des eigentlichen Mine-By Experiments.

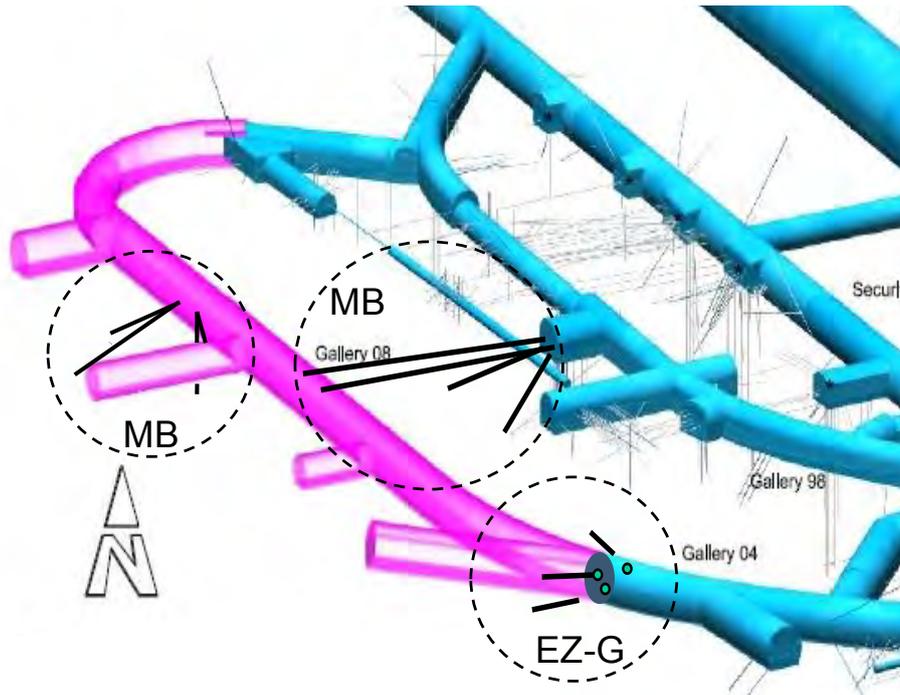


Abb. 12 Lage der hydraulischen Messbohrungen der GRS

Da die Modellierung des eigentlichen Mine-By Experiments zurzeit noch andauert, sollen an dieser Stelle die Mess- und Modellierungsergebnisse zum EZ-G-Bereich dargestellt werden.

Die Lage der EZ-G-Messbohrlöcher zeigt Abb. 13. Die beiden Bohrungen BEZ-G6 und BEZ-G7 wurden bei der Auffahrung der Gallery 08 durchtrennt, während BEZ-G8 er-

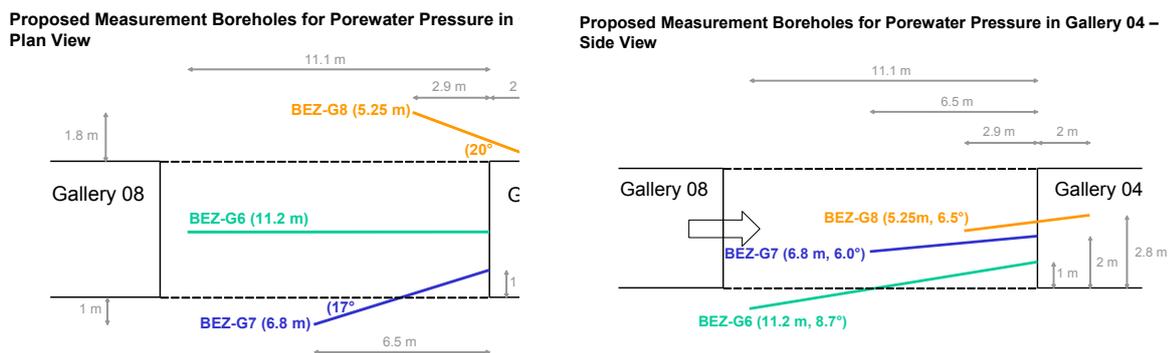


Abb. 13 Lage der Messbohrungen BEZ-G6, G7 und G8 (links: Draufsicht, rechts: Seitenansicht)

Abbildung 14 zeigt die gemessenen Porendrücke zusammen mit dem Auffahrungsfortschritt, dargestellt als Abstand der Auffahrungsfront von der Ortsbrust der Gallery 04.

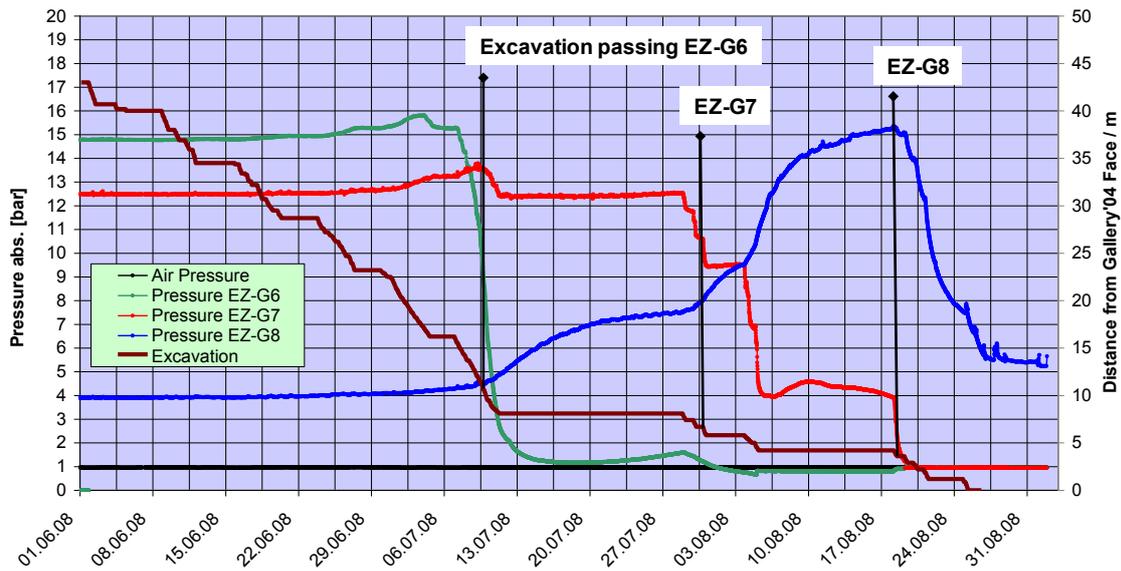


Abb. 14 Druckmesswerte BEZ-G6, G7 und G8 und Abstand der Auffahrungsfront von der Ortsbrust der Gallery 04

Man erkennt, dass die Anfangsdrücke in den verschiedenen Messbohrungen unterschiedlich sind, als Folge des unterschiedlichen Abstandes zur bereits vier Jahre offen stehenden Gallery 04. Alle Messgeber zeigen bei Annäherung der Auffahrungsfront zunächst einen Druckanstieg, der unterschiedlich ausfällt, aber ähnliche Endwerte zeigt. Kurz bevor oder während die Auffahrungsfront den Messgeber passiert, fällt der Druck stark ab.

Zur Interpretation der Messergebnisse wurde die Auffahrung der Gallery 08 im EZ-G Bereich mit CODE_BRIGHT unter folgenden Bedingungen dreidimensional hydraulisch-mechanisch gekoppelt modelliert.

- Die Spannungsanisotropie wurde durch einen primären Spannungstensor mit $\sigma_V = 6.5 \text{ MPa}$, $\sigma_H = 4.3 \text{ MPa}$ und $\sigma_h = 2.2 \text{ MPa}$ berücksichtigt.
- Der Tonstein wurde rein elastisch, ohne viskoplastisches Materialverhalten und ohne Schädigung modelliert, eine EDZ-Generierung wurde (abgesehen von einer Sättigungsänderung am Hohlraumrand) nicht berücksichtigt.
- Die Schichtungsanisotropie wurde durch eine anisotrope Permeabilität $k = 0.6 - 2.0 \text{ E-20 m}^2$ berücksichtigt.

- Entsättigung am Hohlraumrand wurde durch eine negative Porendruckrandbedingung (Saugspannung) berücksichtigt.

Das Berechnungsmodell zeigt Abb. 15 (links). Die Berechnung startete mit der Auffahrung der Gallery 04, um die anfängliche Porenwasserdruckverteilung im Bereich der Messbohrungen simulieren zu können. Es zeigte sich, dass ein Anfangsdruck von 1.5 MPa zu realistischen Drücken in den Messbohrungen führte (Abb. 16). Porendrücke unterhalb 1.5 MPa bei Auffahrungsbeginn der Gallery 08 sind in Abb. 15 farbig dargestellt; eine Momentaufnahme während der Auffahrung zeigt die rechte Seite von Abb. 15.

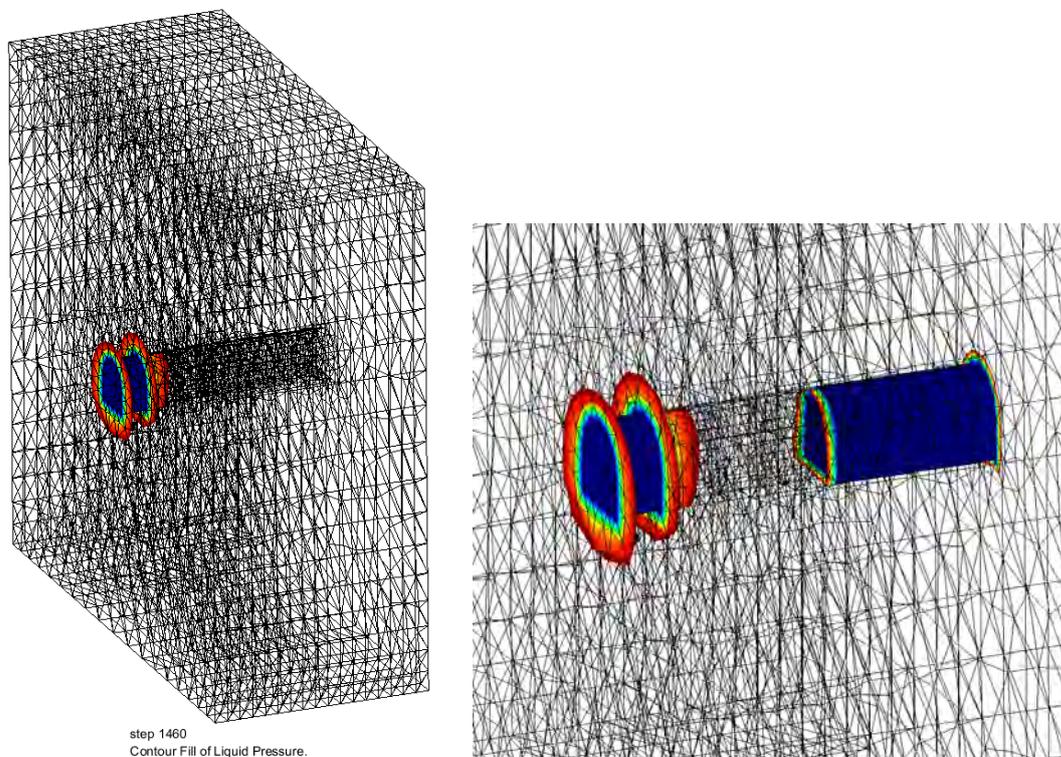


Abb. 15 Berechnungsmodell und Porendrücke unterhalb 1.5 MPa bei Auffahrungsbeginn von Gallery 08 (links), Momentaufnahme der Auffahrung (rechts)

Die Ergebnisse der Modellierung im Vergleich mit den Messwerten während der Auffahrung der Gallery 08 sind in den Abbildungen 17 und 18 dargestellt. Die Messkurven werden durch die Modellierung qualitativ reproduziert (mit Ausnahme der negativen Porendrücke bei BEZ-G6, die messtechnisch nicht erfassbar sind), allerdings zeigen sich in der Modellierung Druckspitzen bzw. überhöhte Drücke, die nicht gemessen wurden. Hauptgrund für diese Abweichung ist sicher das rein elastisch modellierte

Verhalten des Tonsteins, insbesondere die Vernachlässigung der Schädigung, da die mit der Schädigung einhergehende Permeabilitätserhöhung zu einer Beschleunigung von Fließbewegungen und Porendruckabbau führt.

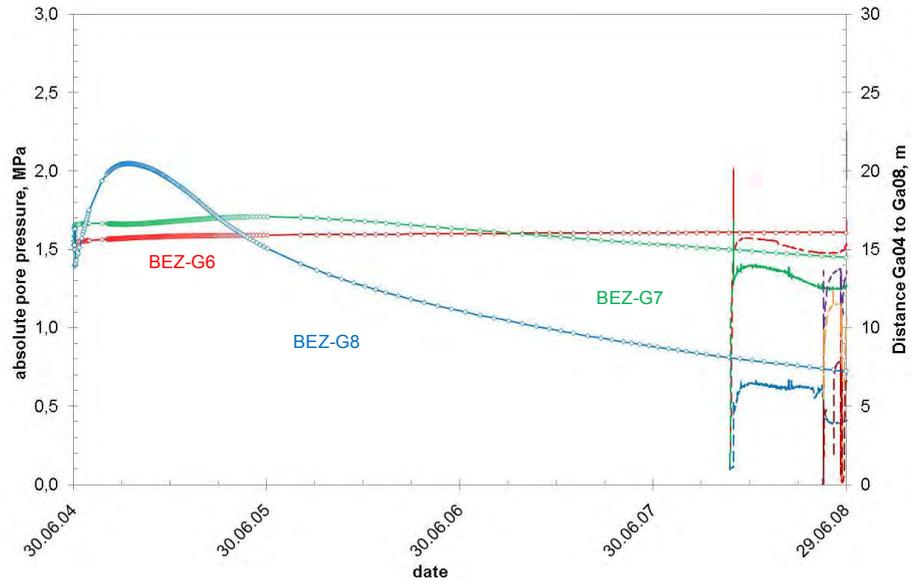


Abb. 16 Rechenergebnisse für die Porendruckentwicklung an den Messstellen BEZ-G6, G7 und G8 von Auffahrungsbeginn der Gallery 04 bis zur Auffahrung der Gallery 08 und Vergleich mit den Messwerten

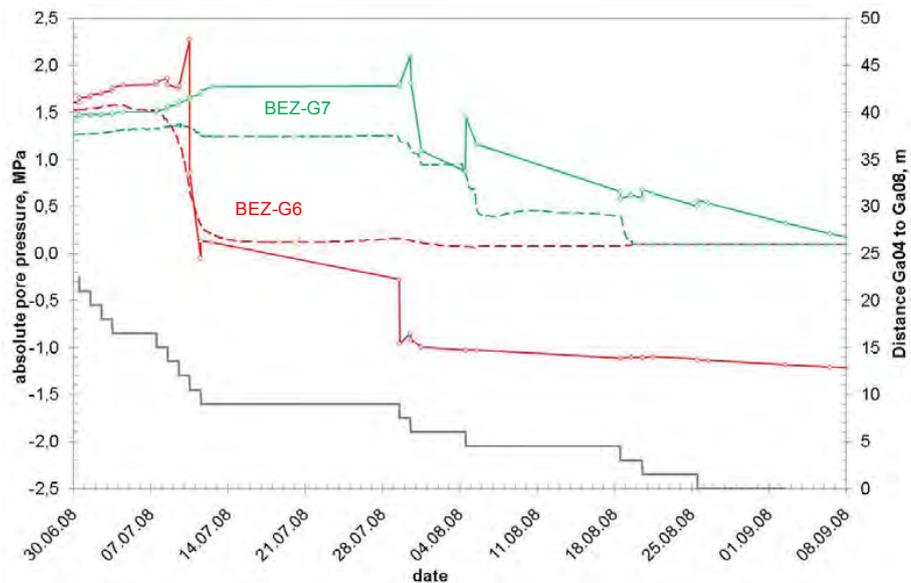


Abb. 17 Rechenergebnisse (durchgezogen) und Messergebnisse (gestrichelt) für die Porendruckentwicklung an den Messstellen BEZ-G6 und BEZ-G7 während der Auffahrung der Gallery 08

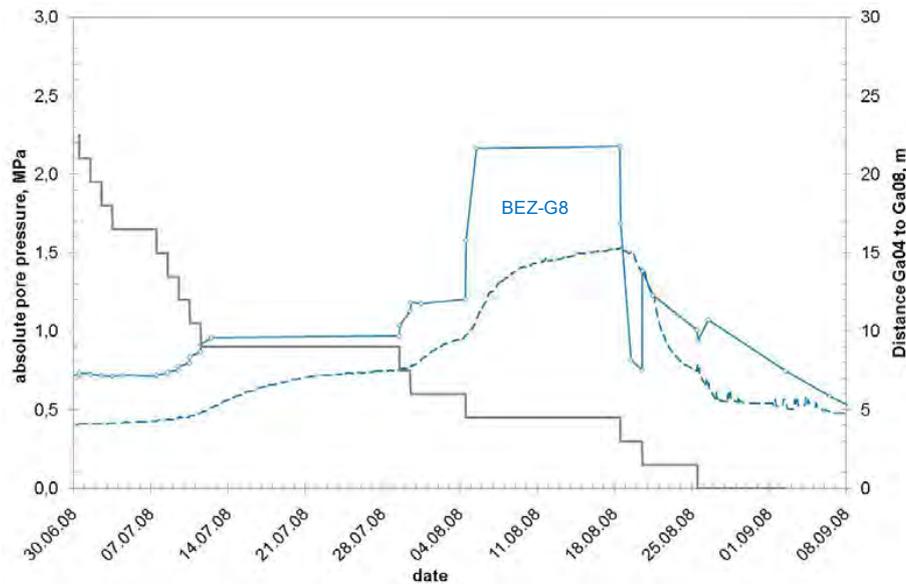


Abb. 18 Rechenergebnisse (durchgezogen) und Messergebnisse (gestrichelt) für die Porendruckentwicklung an der Messstelle BEZ-G8 während der Auffahrung der Gallery 08

3.2.2 Stand weiterer In-situ-Messungen und Modellrechnungen

Der Porendruck in den in Richtung der Gallery 08 gebohrten „langen“ Bohrungen (siehe Abb. 12) zeigte während der Auffahrung ein ähnliches Verhalten wie in den EZ-G-Bohrungen. Die beiden schräg abwärts in den unverritzten Pfeiler (Abb. 12) gebohrten Löcher wurden zusätzlich zur Messung des Gaseintrittsdrucks genutzt. Die Ergebnisse werden im Rahmen des in Vorbereitung befindlichen Abschlussberichts zum Projekt BET (Barriereintegrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs in Tonformationen) dokumentiert.

Die Modellrechnungen zum eigentlichen Mine-By Experiment dauern zurzeit noch an. Sie sollen bis zum Ende von 2010 beendet und im Abschlussbericht zum Experiment dokumentiert werden.

Zur Messung der Langzeitverformung wurde im Mai/Juni 2009 ein horizontales schichtparalleles Bohrloch angelegt und in 14 m Tiefe mit einer Dilatometersonde versehen; zusätzlich wurden in dem verschlossenen Bohrloch Temperatur- und Feuchtefühler installiert. Die bisherigen Messergebnisse und zugehörige Modellrechnungen wurden bei der Tagung „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“ im März 2010 in Nantes vorgetragen /CZA 10/. Es zeigte sich, dass

ein elastisches Modell zur Beschreibung der zeitabhängigen Verformung des Tonsteins nicht hinreichend erklärt, so dass entweder eine zeitabhängige Schädigung oder eine viskoplastische Verformung (oder beides) hinzukommt.

3.3 Offene Fragen und geplante Weiterarbeit

Die Modellrechnungen zum THM-Verhalten des Tonsteins werden bei der GRS mit dem bei UPC in Barcelona entwickelten Programm CODE_BRIGTH durchgeführt.

Bei den bisherigen Rechnungen wurden verschiedene Vereinfachungen getroffen:

- Der Tonstein wurde rein elastisch, ohne viskoplastisches Materialverhalten und ohne Schädigung oder Wiederverheilung modelliert.
- Entsättigung am Hohlraumrand wurde nur durch eine negative Porendruckrandbedingung (Saugspannung) berücksichtigt.
- Quellung oder Schrumpfung auf Grund von Sättigungsänderungen wurde nicht betrachtet

Spannungs- und Materialanisotropie wurden hingegen berücksichtigt.

Tatsächlich ist in CODE_BRIGTH mit dem sogenannten Argillite-Modell ein Stoffansatz implementiert, der Schädigung und Quellung/Schrumpfung berücksichtigen kann. Dabei handelt es sich um ein Zwei-Komponenten-System, wobei den „Körnern“ aus Ton die plastischen Eigenschaften zugewiesen werden und die elastischen „Bonds“ geschädigt werden können. Das Mengenverhältnis zwischen Körnern und Bonds ist variabel.

Obwohl UPC bereits Rechenergebnisse vorgestellt hat, bei denen dieser Ansatz verwendet wurde, ist die Dokumentation bisher nicht hinreichend, um das Modell als Nichtentwickler erfolgreich einzusetzen. Darüberhinaus ist eine Verheilung, wie sie in Laborversuchen der GRS /ZHA 10a/ nachgewiesen wurde, nicht implementiert.

Aus diesem Grund plant GRS eine andere Erweiterung der Stoffmodelle zur Schädigung und Verheilung von Tonstein, das als „Dichtekolloidmodell“ /ZHA 10b/ bereits vorgestellt wurde und im Gegensatz konventionellen Modellen, die ein poröses Medium betrachten, davon ausgeht, dass Ton- bzw. Mineralkörner durch adsorbiertes Was-

ser verbunden sind. Das Gesamtsystem kann dann als kompaktiertes Kolloid betrachtet werden, wobei das adsorbierte Wasser spannungstragfähig ist. Phänomene wie Quellung, Schrumpfung, Schädigung und Verheilung lassen sich bei Zugrundelegung eines solchen Modells leichter interpretieren und modellieren. Daher soll dieser Modellansatz weiter verfolgt und durch Experimente verifiziert werden.

4 Danksagung

Das Projekt THERESA wurde von der Kommission der Europäischen Gemeinschaft unter der Vertragsnummer FP6-036458 und vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie unter dem Förderkennzeichen 02 E 10236 gefördert.

Das Projekt THM-Ton wird vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie unter dem Förderkennzeichen 02 E 10377 gefördert.

Die Autoren danken für die Unterstützung.

Weiterer Dank geht an die Schweizer Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (Nagra) und an das Schweizer Bundesamt für Landestopografie (Swisstopo) für die erfolgreiche und angenehme Zusammenarbeit im Untertagelabor Mont Terri.

5 Literatur

/CEC 03/ Impact of the excavation disturbed or damaged zone (EDZ) on the performance of radioactive waste geological repositories, Proceedings of a European Commission Cluster conference and workshop, Luxembourg, 3 to 5 November 2003, eds. C. Davies and F. Bernier, Brussels: European Commission.

/CZA 10/ Czaikowski, O., Wieczorek, K.: Identification of potential driving mechanisms for HM coupled time-dependent deformation of argillaceous rocks, Vortrag beim 4th International Meeting on Clays in Natural & Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Nantes, 29. März – 1. April 2010.

- /ROT 09/ Rothfuchs, T., Schulze, O., Buhmann, D., Müller-Hoeppe, N.: Conference on the Impact of Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical (THMC) Processes on the Safety of Underground Radioactive Waste Repositories. – Summary of Salt Group Discussions. Luxembourg, September 29 - October 1, 2009.
- /WIE 07/ Wieczorek, K., T. Rothfuchs, C.-L. Zhang, Th. Spiers, U. Heemann, Chr. Lerch, S. Keesmann, A. Pudewills, P. Kamlot, J. Grupa, K. Herchen, S. Olivella and Chr. Spiers: Compilation of existing constitutive models and experimental field or laboratory data for the thermal-hydraulic-mechanical (THM) modelling of the excavation disturbed zone (EDZ) in rock salt, European Commission, THERESA project, Deliverable D5, Coordinated by Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, Germany, 28 August 2007.
- /WIE 08/ Wieczorek, K., U. Heemann, S. Keesmann, A. Pudewills, S. Olivella, P. Kamlot, C. Spiers and K. Herchen: THERESA project, Work Package 3, Deliverable D6 - calibration of thermal-hydraulic-mechanical (THM) models of the excavation disturbed zone (EDZ) in rock salt, Coordinated by Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, Germany, 14 April 2008.
- /WIE 09a/ Wieczorek, K., Grupa, J., Kamlot, P., Keesmann, S., Herchen, K., Heemann, U., Olivella, S., Pudewills, A.: Theresa project, Deliverable D8: Model Application on Laboratory Benchmark Test, Coordinated by Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, Germany, 31 August 2009.
- /WIE 09b/ Wieczorek, K. T. Rothfuchs, B. Förster, U. Heemann, S. Olivella, Chr. Lerch, A. Pudewills, P. Kamlot, J. Grupa, K. Herchen: THERESA Deliverable D9, Coupled Processes in Salt Host-Rock Repositories - Final Report of Work Package 3, Coordinated by Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 30 November 2009.
- /ZHA 09/ Zhang, C.-L., Wieczorek, K., Rothfuchs, T.: Theresa Project, Work Package 3, Deliverable D7, Laboratory Benchmark Tests on rock salt, Coordinated by Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, Germany, 30 March 2009.

/ZHA 10a/ Zhang, C.-L.: Experimental Evidence for Self-Sealing of Fractures in Claystone, Vortrag beim 4th International Meeting on Clays in Natural & Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Nantes, 29. März – 1. April 2010.

/ZHA 10b/ Zhang C.-L, Wieczorek, K., Xie M.-L.: Swelling Experiments on Mudrocks, Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering. 2010, 2 (1): 41–47

**Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen
geologischen Formationen: 9. Projektstatusgespräch**

**Untersuchungen zum THM-Verhalten von Steinsalz und
Tonstein mit Schwerpunkt EDZ**

Klaus Wieczorek, Oliver Czaikowski, Chun-Liang Zhang, GRS
Karlsruhe, 15. Juni 2010

Zeitabhängige Verformung und EDZ

Salz und Tongestein zeichnen sich gegenüber z. B. Kristallin durch ein ausgeprägtes zeitabhängiges Verformungsverhalten aus.

- Deviatorische Spannungen können schadigungsarm abgebaut werden
- Langfristig Rekompaktion oder sogar Verheilung geschädigter Bereiche

Folge: Die Auflockerungszone (EDZ) mit ihrer erhöhten Permeabilität und der daraus resultierenden Bedeutung für die Wirksamkeit von Verschlussbauwerken ist keine zeitliche Konstante.

- Im trockenen Steinsalz: Zeitabhängige Deformation ausschließlich als Folge des mechanischen Spannungszustandes (Kriechen, Dilatanz, Rissbildung, Rekompaktion)
- Im wassergesättigten Tonstein: Zeitabhängige Deformation auch als Folge von Porendruck- oder Sättigungsänderungen

Vorgestellte Projekte

Im Fachbereich Endlagersicherheitsforschung wurden bzw. werden in den letzten Jahren mehrere Projekte zum Thema EDZ und zeitabhängige Verformung in Steinsalz und Tongestein durchgeführt. Hier vorgestellt werden

- THERESA (Coupled thermal-hydrological-mechanical-chemical processes for application in repository safety assessment) – Arbeitspaket (WP) 3: Salz
- THM-Ton (Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen)

THERESA WP3: Zielsetzung und Partner

Zielsetzung

- Prüfung und Verbesserung der Fähigkeiten von konstitutiven Modellen und Rechenprogrammen zur Analyse gekoppelter THMC-Prozesse mit dem Schwerpunkt auf dem Einfluss von thermisch-hydraulisch-mechanischen (THM) Prozessen auf die Langzeitentwicklung der EDZ

Partner im Arbeitspaket 3

- Deutschland: GRS, BGR, DBE TEC, FZK, IfG, TUC
- Spanien: CIMNE
- Niederlande: NRG, (UU)

Bezug zum Förderkonzept des BMWi

- B: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern – B4: Verhalten von geotechnischen Barrieren - Modellierung des Langzeitverhaltens von Abschlussbauwerken bzw. deren Komponenten

THERESA WP3: Arbeitsprogramm

- Feststellung der Fähigkeiten und/oder des Entwicklungsbedarfs der von den Partnern eingesetzten numerischen Simulationsprogramme und Zusammenstellung von für die Modellkalibrierung bzw. –verbesserung relevanten Daten
- Implementierung der kalibrierten/verbesserten Modelle in den Programmen und Test der Modelle
- Definition, Durchführung und Benchmark-Modellierung eines THM-Laborversuchs
- Integration der Ergebnisse der Prozesslevel-Programme in ein Programm zur integrierten Sicherheitsanalyse (Total System Performance Assessment, TSPA) und Berechnung eines Endlager-Referenzfalles

ThERESA WP3: Überblick der eingesetzten Modelle

Die meisten in ThERESA eingesetzten Prozessmodelle basieren auf der Betrachtung des Gesteins als Kontinuum und auf dem Dilatanzkonzept.

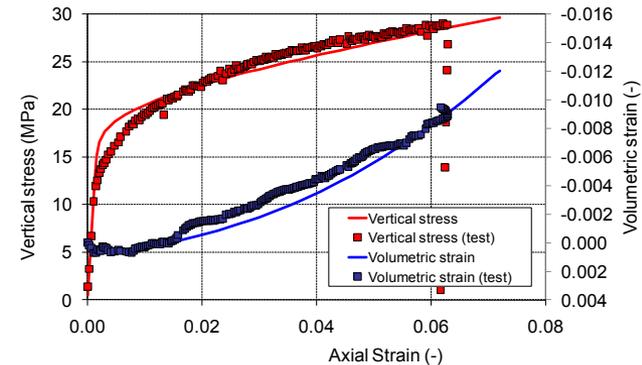
- Fünf Formulierungen zur Berechnung von Dilatanz/Rekompaktion: BGR, CIMNE, FZK, IfG und TUC verwendeten jeweils eigene Ansätze, DBE TEC implementierte die von FZK und CIMNE
- Vier verschiedene Ansätze zur Permeabilitätsberechnung:
 - BGR, FZK, IfG, DBE TEC: Permeabilität als Funktion von Porosität und minimaler Hauptspannung.
 - TUC: Permeabilität als Funktion von Dilatanz (Sekundärporosität) und minimaler Hauptspannung.
 - CIMNE: 2 Permeabilitäts-Porositätsbeziehungen, Kozeny-Typ und Simulation von Mikrorissen, die durch eine Öffnungsweite und einen konstanten Abstand zueinander charakterisiert sind.

Zusätzlich:

- Testweiser Einsatz eines DEM- (Discrete Element Method) Programms, DBE TEC
- Mikrophysikalisches Modell zu Risschließung und Verheilung, NRG/UU

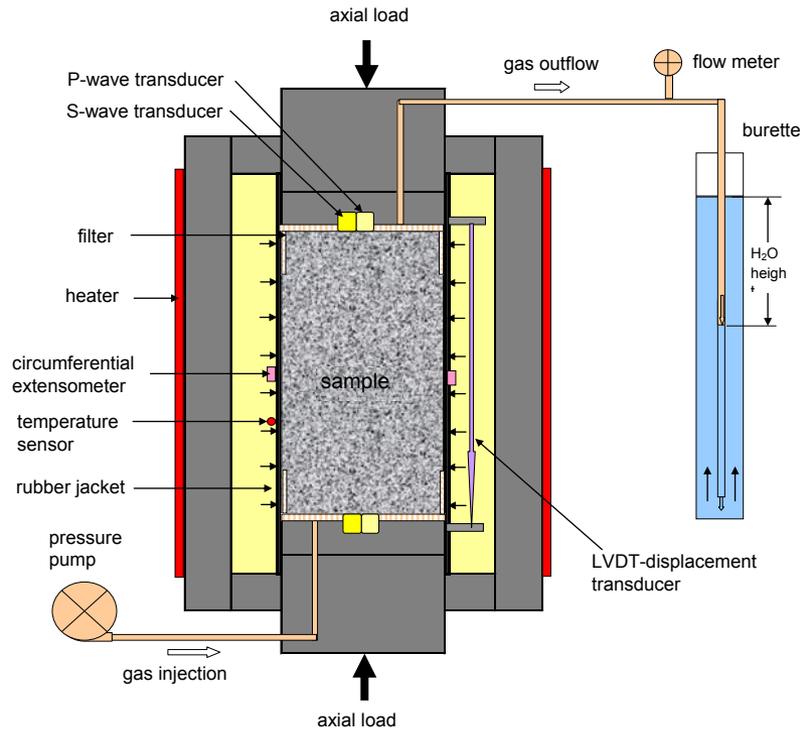
THERESA WP3: Modellkalibrierung

- Zur Erweiterung der Datenbasis für die Kalibrierung der Modelle wurden von GRS mehrere Triaxialversuche an Steinsalzproben durchgeführt, bei denen die Volumendeformation und die Gaspermeabilität unter wechselnden Spannungsbedingungen gemessen wurden.
- Mehrere Partner setzten diese Versuche zur Kalibrierung ihrer Modelle ein.
- Bei Beginn des Benchmarkversuchs waren alle auf dem Dilatanzkonzept beruhenden Modelle soweit kalibriert, dass eine erfolgreiche Benchmarksimulation erwartet wurde.

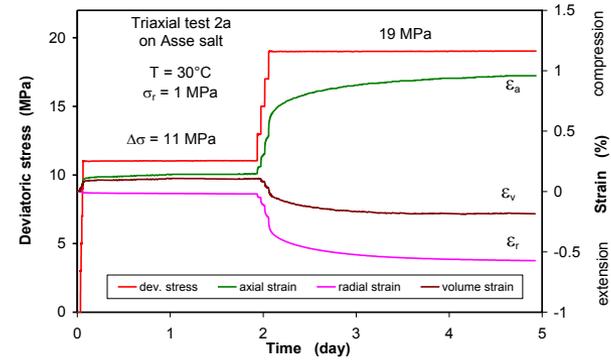


*Beispiel für die Modellkalibration:
Entwicklung von Axialspannung und
Volumendehnung einer Steinsalzprobe
als Funktion de Axialverformung, ge-
messen (GRS) und berechnet (CIMNE)*

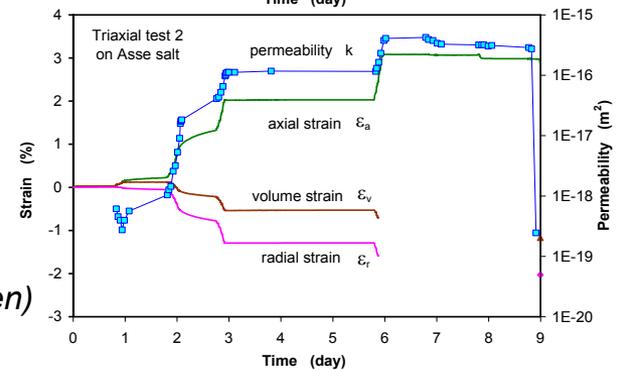
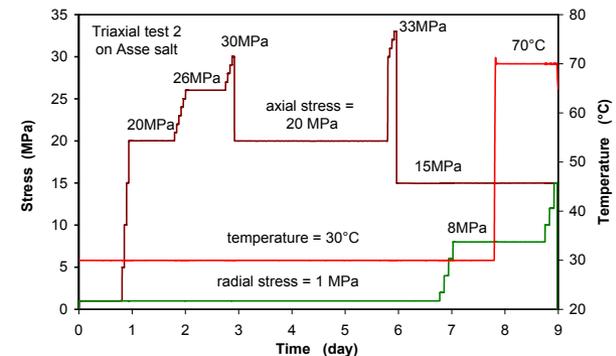
THERESA WP3: Benchmarkversuch



Versuchsaufbau beim Benchmark-Experiment



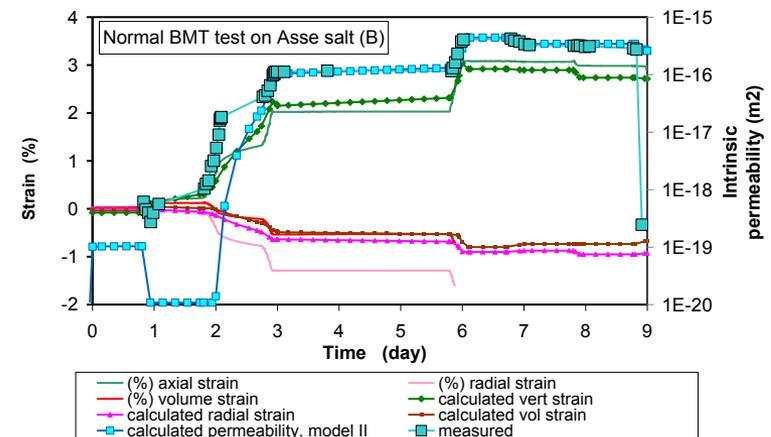
Versuchsphase TC2A: Die ersten beiden Belastungsstufen



Versuchsphase TC2B: Belastungsstufen (oben) und Messergebnisse für Verformung und Permeabilität (unten)

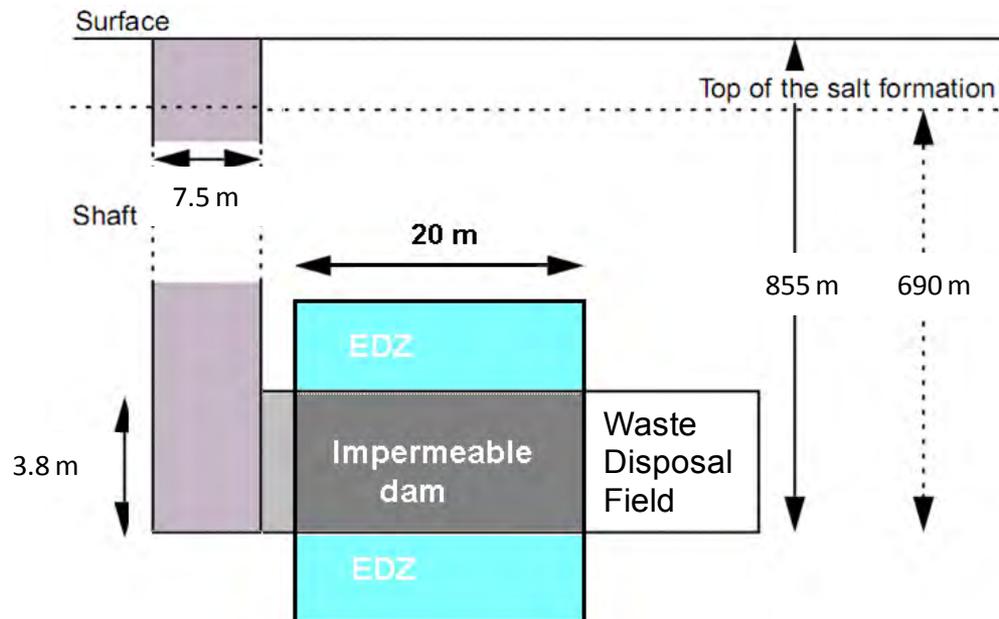
THERESA WP3: Benchmarksimulation

- Die Modellierungsteams erhielten die Daten von TC2A zur Überprüfung ihrer Parameter und die Belastungsstufen von TC2B zur Durchführung einer Prognoserechnung.
- Anschließend Verteilung der Messdaten von TC2B und Interpretationsrechnung.
- Insgesamt: Gute Ergebnisse der verschiedenen Modellierungsteams, nur geringe Anpassungen notwendig.
- Aber: Bei den verschiedenen Teams Abweichungen von den Messungen in verschiedenen Phasen von TC2B.



*Beispiel für ein Modellierungsergebnis:
Entwicklung von Dehnungen und
Permeabilität in TC2B, gemessen (GRS)
und berechnet (CIMNE)*

THERESA WP3: Definition des Referenzfalls



- Potentieller Laugenzufluss über den Schacht
- Streckenquerschnitt 23 m²
- Verschlussmaterial Beton mit konstanter Permeabilität 10^{-19} m²

THERESA WP3: Rechenfälle

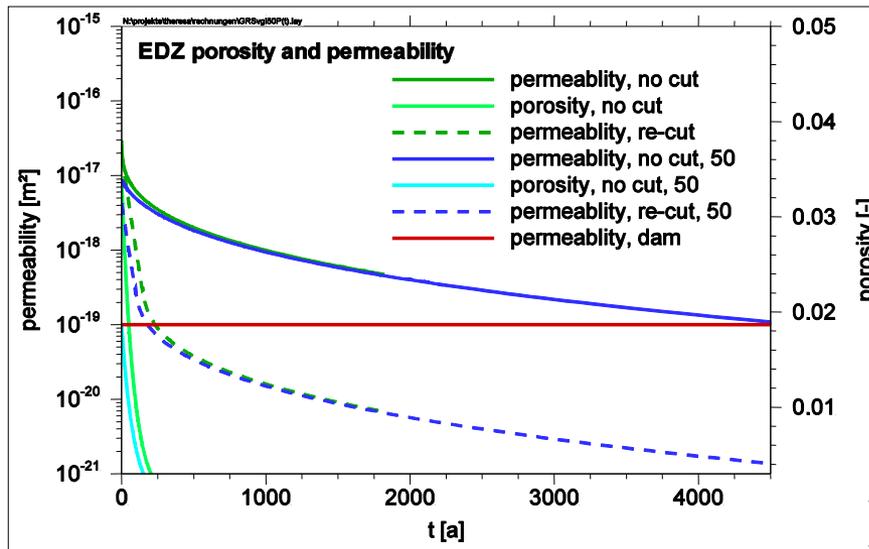
1. Trockene Entwicklung: Vor Einbringung des Streckenverschlusses wird der Streckenrand um 0.5 m rings um die Strecke nachgeschnitten, dann wird der Verschluss eingebaut. Das Gebirge läuft auf den Verschluss auf und die EDZ wird mit der Zeit rekompaktiert, die Permeabilität verringert sich.
2. Wie 1, aber nach 50 Jahren versagt der Schachtverschluss, und Lauge steht unter hydrostatischem Druck auf einer Seite des Verschlusses an.
3. Wie 2, aber die Lauge steht unmittelbar nach Einbau des Streckenverschlusses an (um die Effektivität des Streckenverschlusses allein zu bestimmen).
4. Zusätzliche Fälle 4.1 – 4.3 wie 1 – 3, jedoch ohne vorherigen Nachschnitt der Streckenkontur, d. h. die volle EDZ wird wirksam.

Theresa WP3: Bestimmung der Eingaben für LOPOS

Im EMOS-Modul LOPOS wurde erstmalig eine zeitlich veränderliche EDZ-Permeabilität implementiert. Der zeitliche Verlauf der Permeabilität ist als Eingabe erforderlich, es muss also zuerst durch entsprechende Prozesslevel-Berechnungen eine räumlich konstante äquivalente Permeabilität als Zeitfunktion ermittelt werden.

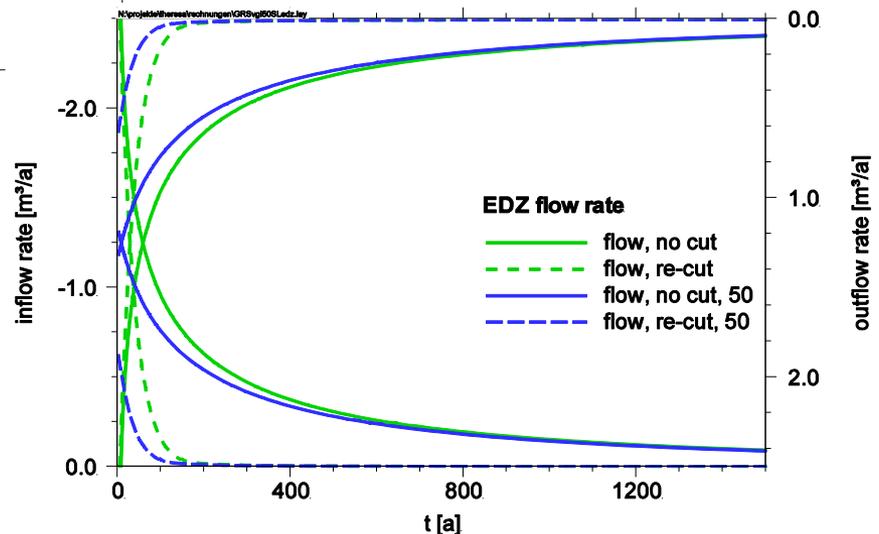
- Für zwei Berechnungsfälle Simulation der mechanische Entwicklung des Systems Strecke bzw. Verschluss/EDZ/Salzgebirge in einem zweidimensionalen Plane-Strain-Modell mit CODE_BRIGTH:
 - 30 Jahre offenstehende Strecke
 - In einem der Fall Nachschneiden der Streckenkontur
 - 6 Monate später Einbau des Verschlusses (Beton) in beiden Fällen
 - Modellierung der weiteren mechanischen Entwicklung über 10 000 Jahre
- Ergebnis: Jeweils eine Porositätsverteilung um die Strecke für verschiedene Zeitpunkte. Aus diesen wurde mit Hilfe der Porositäts-Permeabilitäts-Relation nach Olivella jeweils eine räumlich konstante äquivalente Permeabilität für einen äquivalenten EDZ-Querschnitt von 23 m² ermittelt, die zu gleichem Fluss parallel zur Strecke führt.

THERESA WP3: LOPOS-Rechenergebnisse



Entwicklung der äquivalenten Permeabilität und Porosität der EDZ für die Fälle „Laugenzutritt bei Verschlusseinbau“ und „50 Jahre später“ bzw. „Kontur-Nachschnitt“ und „ohne Nachschnitt“

Entwicklung der Fließrate in den Verschluss und die EDZ bzw. der Ausflussrate für die Fälle „Laugenzutritt bei Verschlusseinbau“ und „50 Jahre später“ bzw. „Kontur-Nachschnitt“ und „ohne Nachschnitt“



Theresa WP3: Beurteilung der LOPOS-Ergebnisse

Die Berechnungsergebnisse sind insofern konservativ, als

- für die Berechnung der äquivalenten Permeabilitätsentwicklung bei der Prozesslevel-Rechnung Parameter verwendet wurden, die eine maximale Dilatanz erzeugen, und
- eine konservative Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung verwendet wurde.

Aber:

- Das in CODE_BRIGTH implementierte Dilatanzmodell kann noch nicht als hinreichend validiert betrachtet werden.
- Die Porositäts-/Permeabilitätsentwicklung wurde für den trockenen Fall berechnet und anschließend für die Berechnung des Laugenflusses durch die EDZ eingesetzt. Tatsächlich hat eine Befeuchtung mit Lauge einen starken (beschleunigenden) Einfluss auf das Kompaktionsverhalten des Steinsalzes, andererseits kann eine Aufsättigung des Porenraums mit Lauge die weitere Kompaktion behindern.

Stand der Forschung gemäß Luxemburg-Workshop

- Die THM-Prozesse im Nahfeld und ihr Einfluss auf die EDZ werden verstanden und in vorhandenen Stoffmodellen angemessen wiedergegeben.
- Die vorhandene Datenbasis ist jedoch dünn und nicht ausreichend für die Absicherung der Modelle, die für den Langzeitnachweis der Verschlusswirksamkeit der geotechnischen Barriere erforderlich ist.
- Weitere Laboruntersuchungen sind erforderlich, insbesondere hinsichtlich der Rekompaktion der EDZ und ihr Zusammenwirken mit der technischen Barriere.
- Erste PA-Rechnungen im Rahmen von THERESA deuten an, dass eine hinreichende Rekompaktion der EDZ in maximal 3000 bis 4000 Jahren erreicht wird, wobei sich dieser Zeitraum durch technische Maßnahmen wie Konturnachschnitt deutlich verringern lässt. Allerdings leiden diese vorläufigen Ergebnisse an den bestehenden Unsicherheiten zum Langzeitverhalten der EDZ.

Empfohlene weiterführende Untersuchungen

- Weitere experimentelle Untersuchungen zum Langzeitkompaktionsverhalten bei mäßigen Spannungen sowie zum Einfluss von Feuchte und erhöhtem Porendruck auf das Rekompaktionsverhalten von geschädigtem Steinsalz zur Vervollständigung der Datenbasis für die Modellüberprüfung
- Weiterentwicklung und Validierung der Stoffmodelle einschließlich der Überprüfung ihrer Eignung für die Anwendung auf In-situ-Verhältnisse
- Implementierung der von umfassend kalibrierten Prozesslevel-Modellen ermittelten zeitabhängigen EDZ-Permeabilität in TSPA-Programme und Durchführung zuverlässiger Vorhersagen potentieller Laugenzuflüsse

THM-Ton: Ziel

Ziel

- Erweiterung der Datenbasis zum THM-Verhalten des Tonsteins durch geeignete Experimente und Weiterentwicklung vorhandener Modellvorstellungen und Untersuchungsmethoden zur Verbesserung der Beschreibung und Berechenbarkeit des THM-Verhaltens von Tonstein

Bezug zum Förderkonzept des BMWi

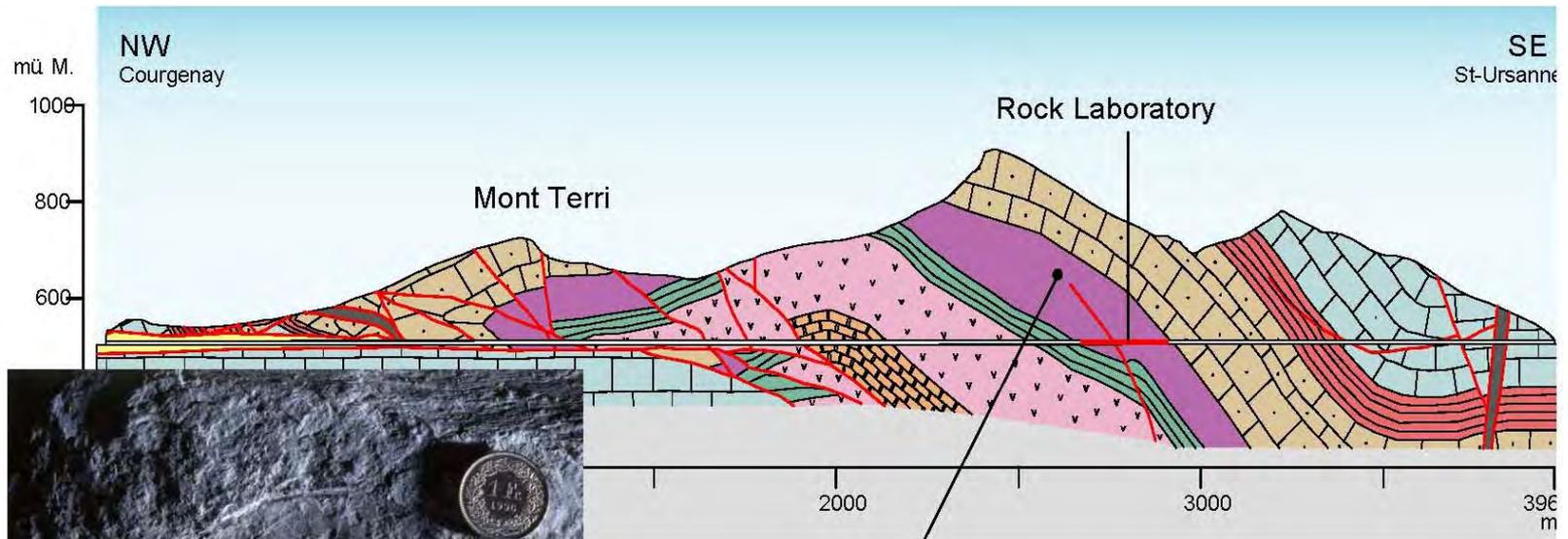
- B: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern – B2: Verhalten der Wirtsgesteinsformation: Untersuchung und Modellierung des geomechanischen, geochemischen und thermohydromechanischen Verhaltens von Steinsalz und Tonsteinen

THM-Ton: Arbeitsprogramm

- In-situ-Untersuchung der hydraulischen Reaktion auf eine Tunnelauffahrung im Untertagelabor Mont Terri durch Messungen von Porenwasserdruck und Permeabilität im Rahmen des Mont Terri Mine-By Experiments
- Untersuchung des zeitabhängigen Verformungsverhaltens des Tonsteins in einem verschlossenen Bohrloch
- Laborversuche an Tonstein zum Verformungsverhalten, zum Quellverhalten, zur Verheilung und zur Auswirkung erhöhter Temperatur auf das HM-Verhalten sowie Laborversuche an Tonversatz (Auffahrungsrückstand)
- Modellierung der In-situ- und Laborexperimente



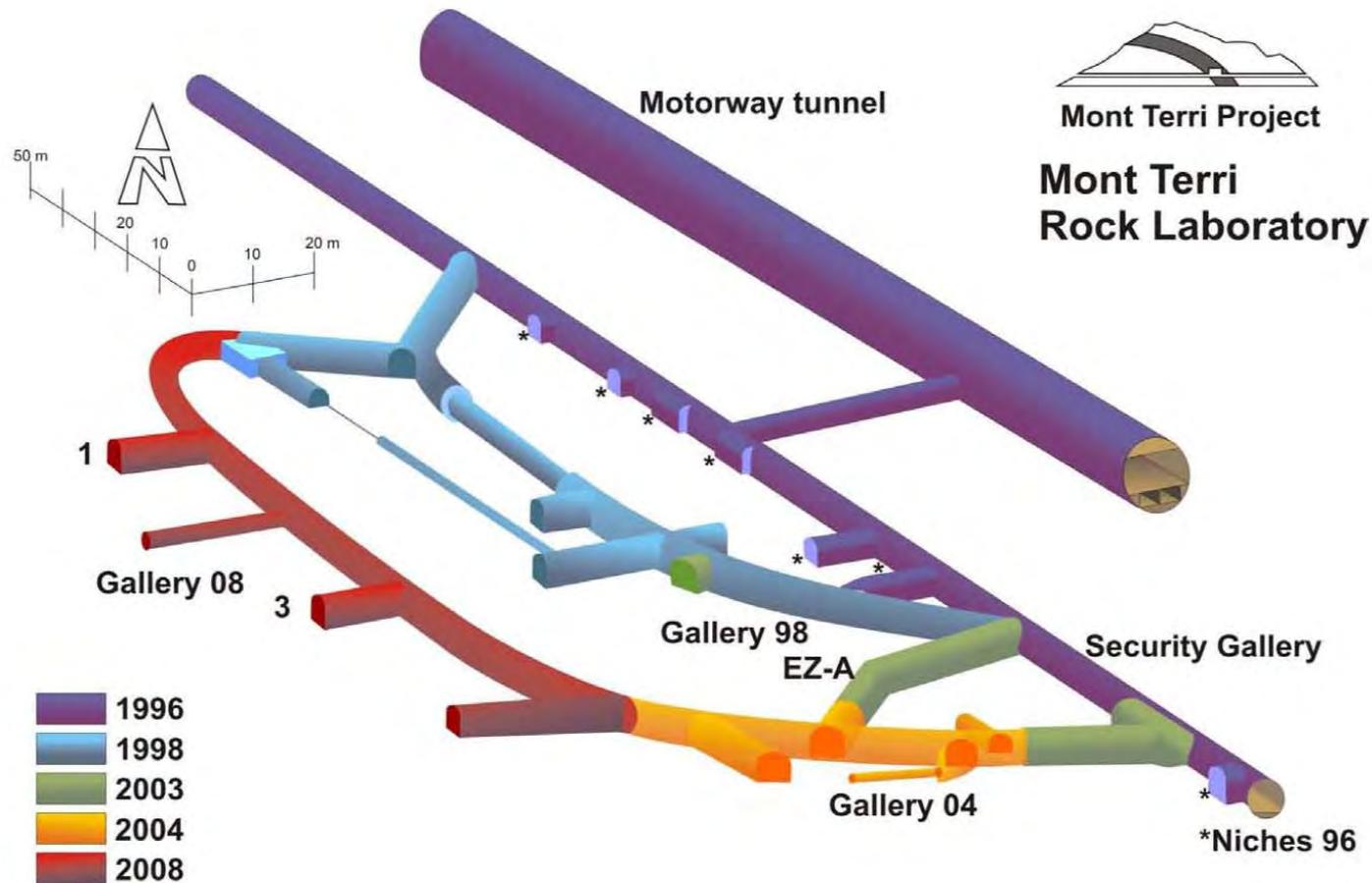
Mont Terri: Geologischer Überblick



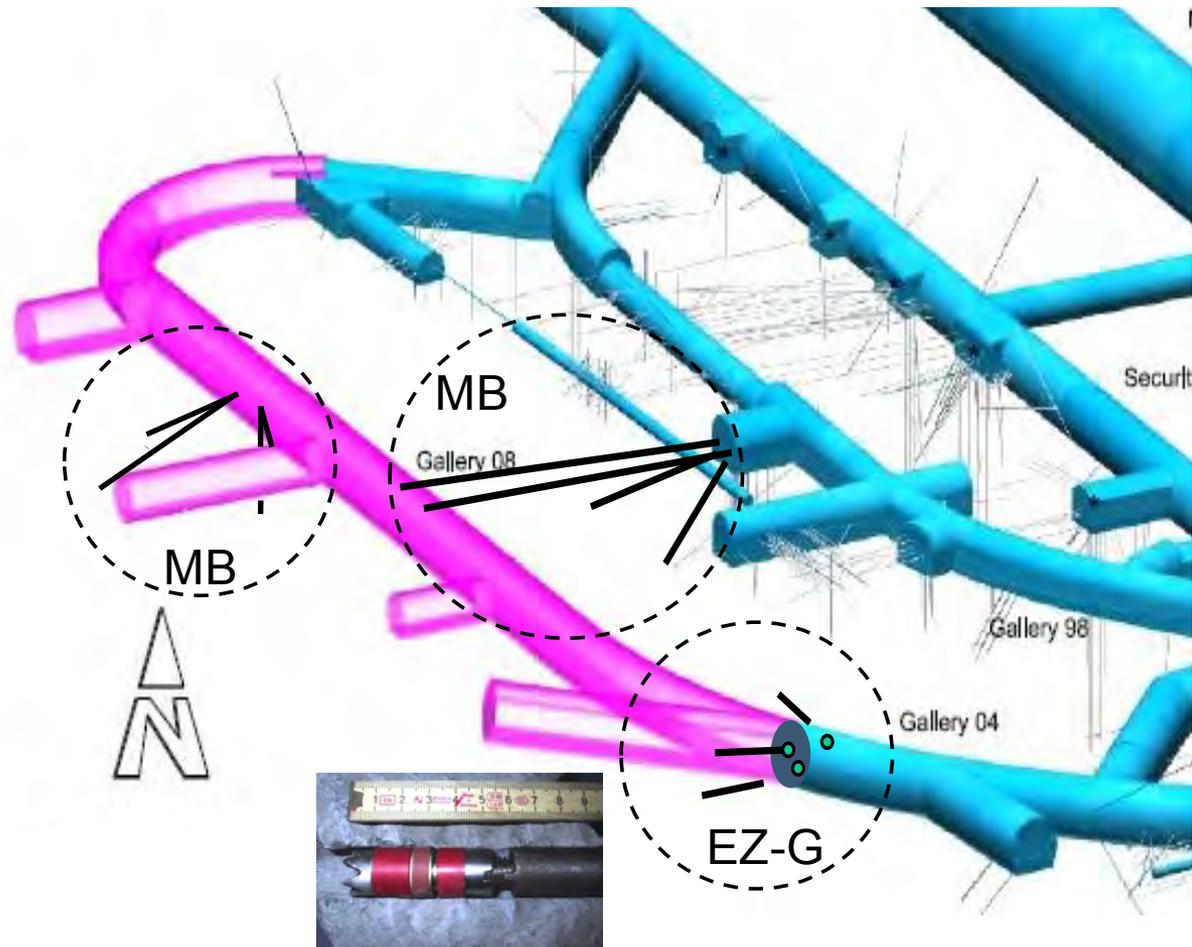
Opalinus
Clay

Leyoceras opalinum, 180 My

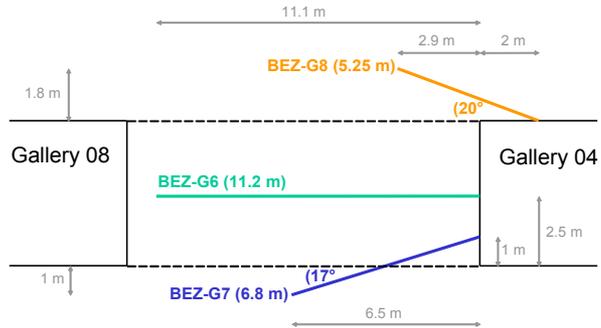
Mont Terri Untertagelabor



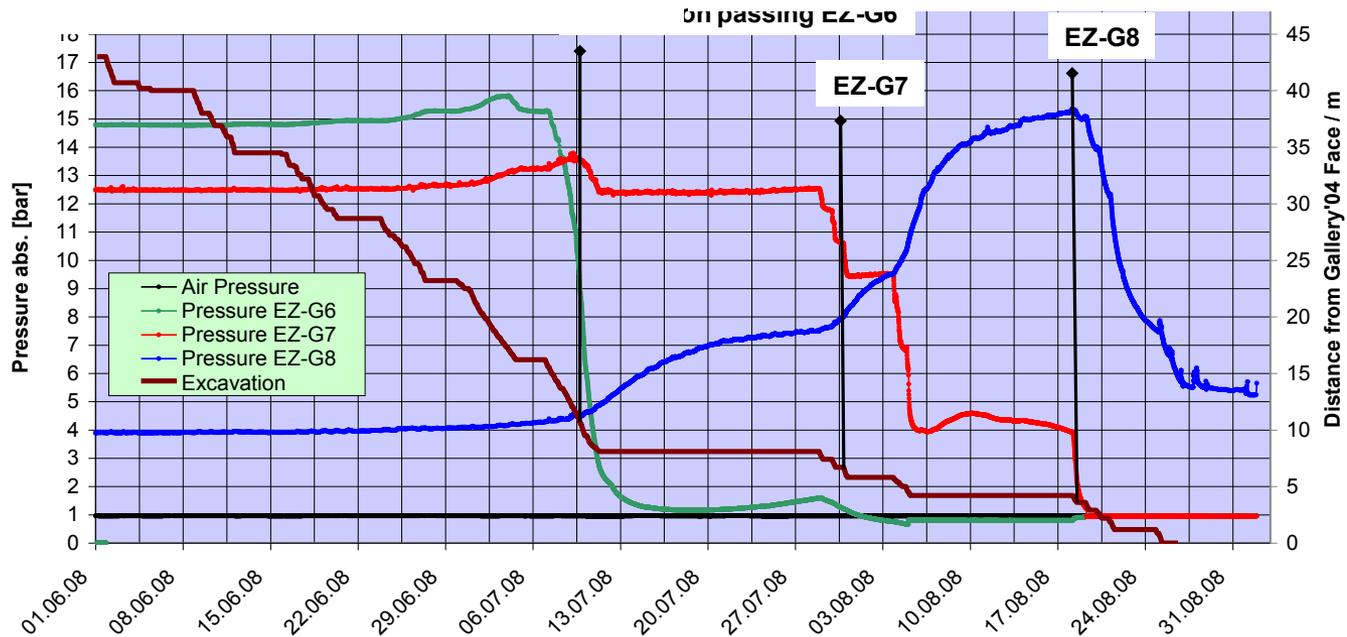
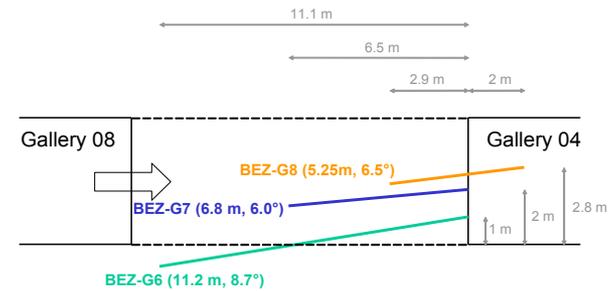
Lage der hydraulischen Messbohrungen der GRS



Proposed Measurement Boreholes for Porewater Pressure in Gallery 04 – Plan View



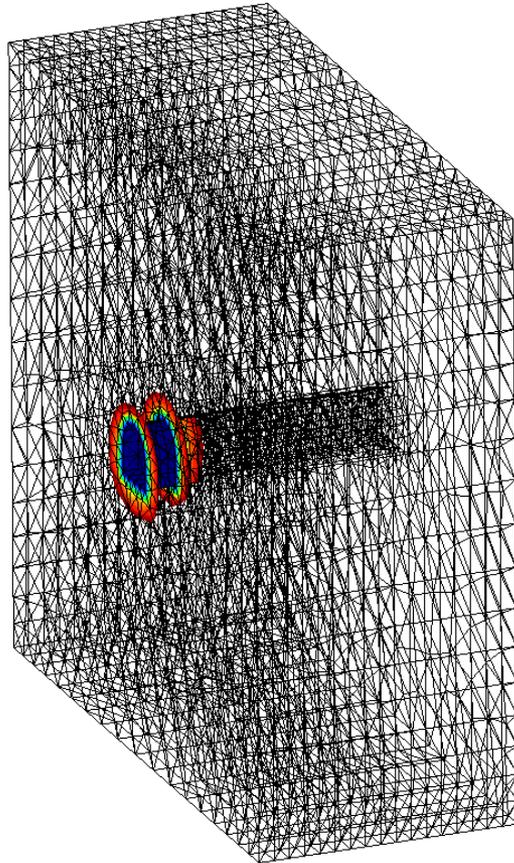
Proposed Measurement Boreholes for Porewater Pressure in Gallery 04 – Side View



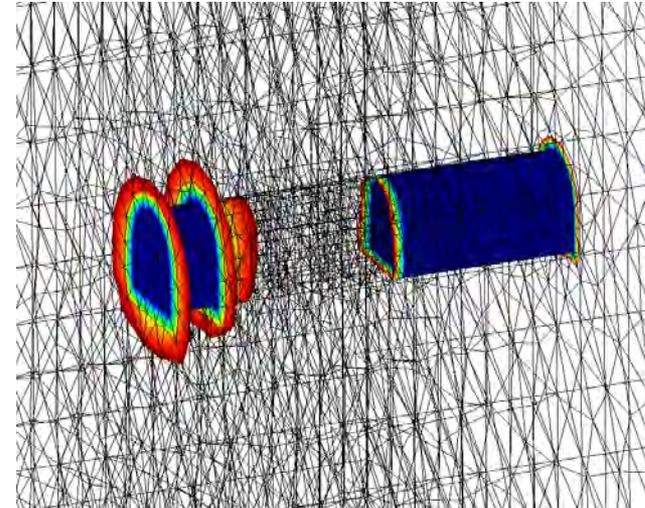
Annahmen für die hydraulisch-mechanische Modellierung der Gallery 08 Auffahrung

- Spannungsanisotropie: Primärspannung $\sigma_V = 6.5$ MPa, $\sigma_H = 4.3$ MPa, $\sigma_h = 2.2$ MPa
- Tongestein rein elastisch, ohne viskoplastisches Materialverhalten und ohne Schädigung, keine EDZ-Generierung (abgesehen von Sättigungsänderung)
- Schichtungsanisotropie: anisotrope Permeabilität $k = 0.6 - 2.0$ E-20 m²
- Entsättigung am Hohlraumrand: negative Porendruckrandbedingung (Saugspannung)

Berechnungsmodell und Porendrücke unterhalb 1.5 MPa bei “Auffahrungsbeginn” der Gallery 08 und während Auffahrung



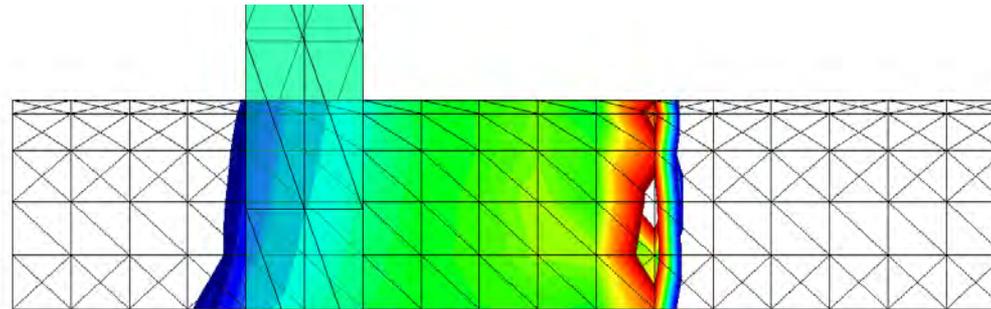
step 1460
Contour Fill of Liquid Pressure.



Modellausschnitt mit Porendrücken unterhalb 1.5 MPa während der Auffahrung

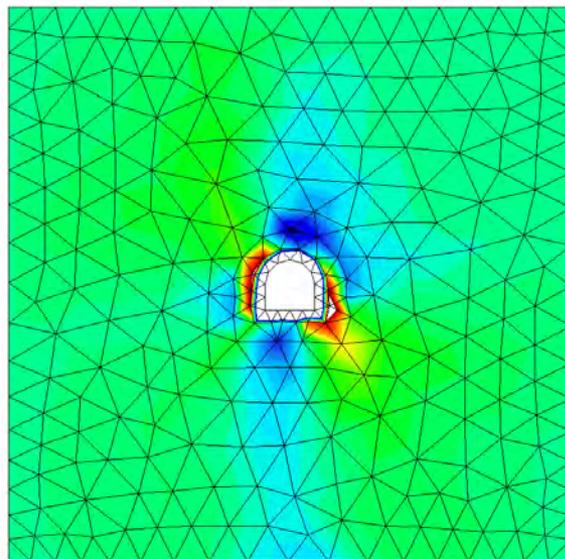
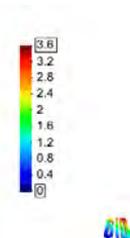
Berechnungsmodell und Porendrücke unterhalb 1.5 MPa bei Auffahrungsbeginn im Modell

Porendruckverteilungen - Schnitte



*Längsschnitt mit Porendruckverteilung
während der Auffahrung*

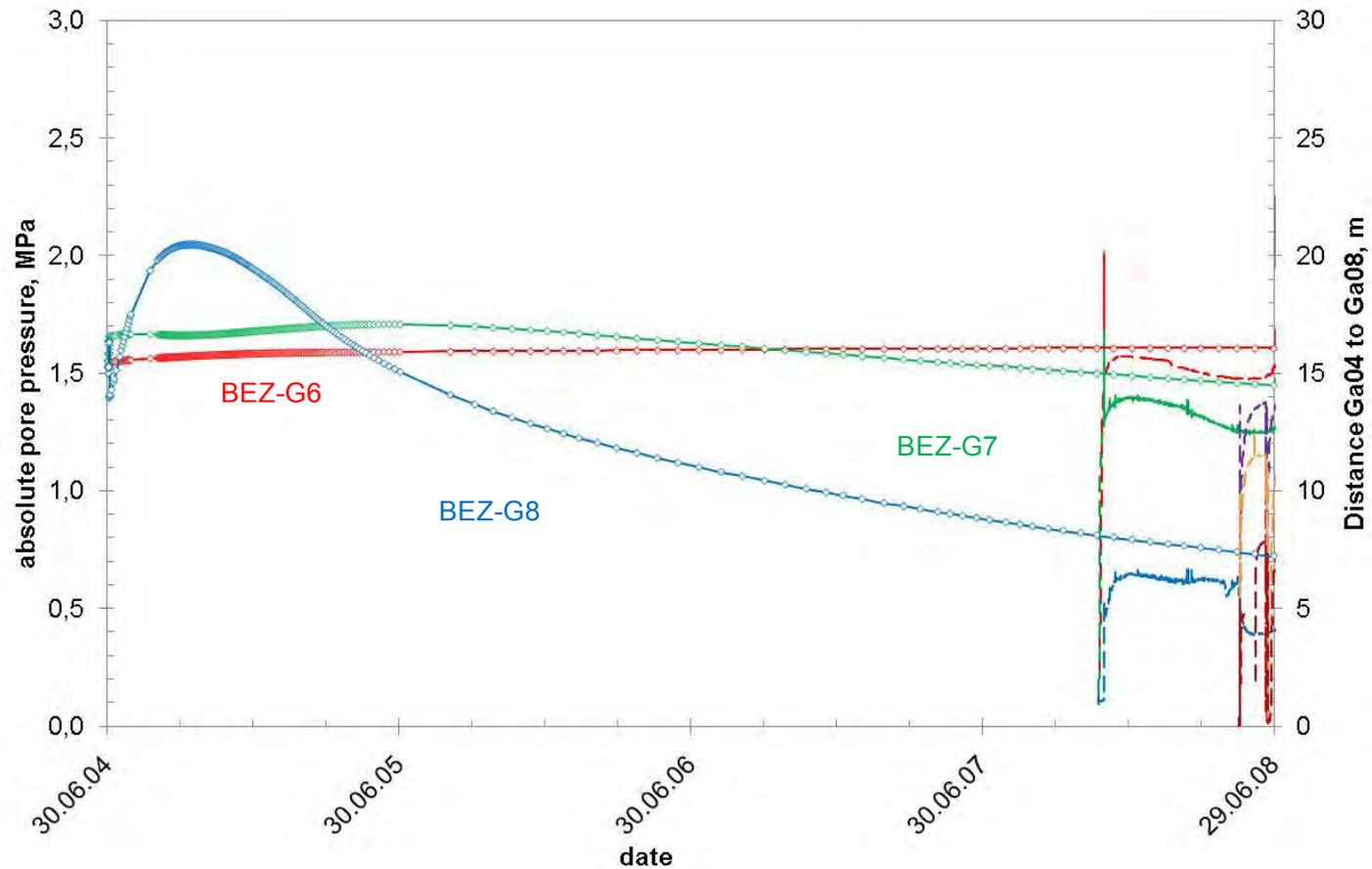
step 1468
Contour Fill of Liquid Pressure.



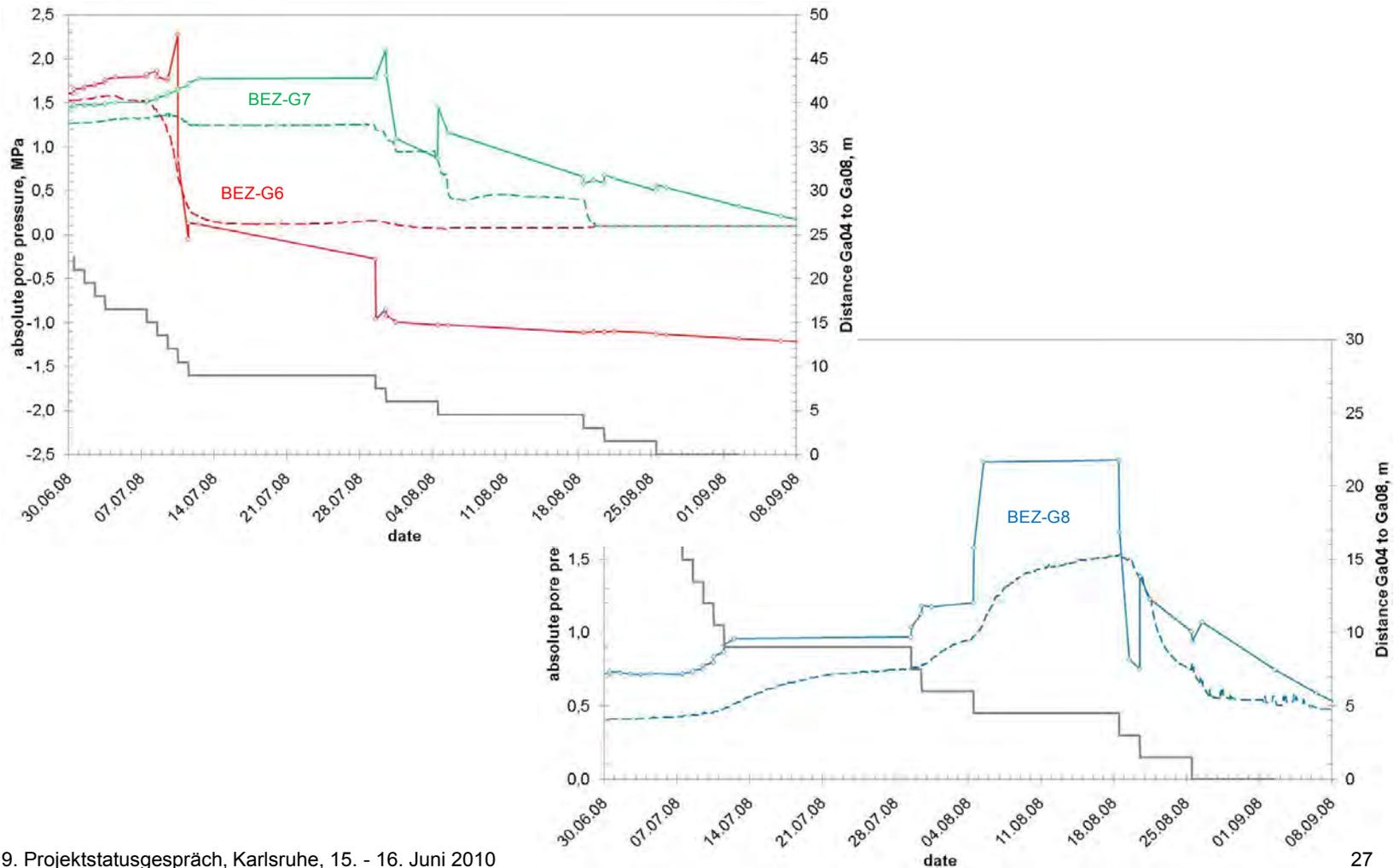
*Querschnitt mit Porendruckverteilung
nach Durchbruch*

step 1517
Contour Fill of Liquid Pressure.

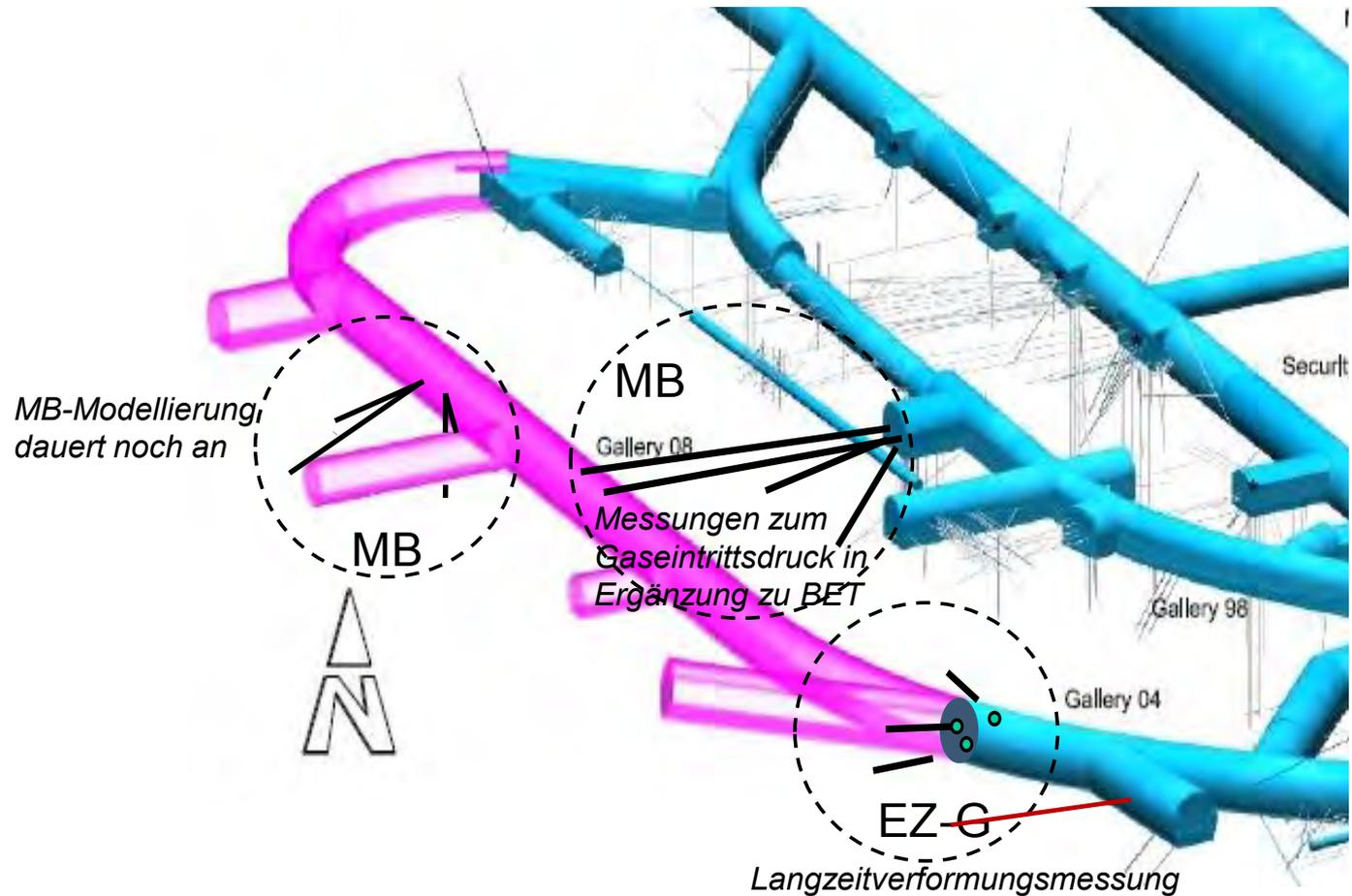
Berechnete und gemessene Porendruckentwicklung an den Messstellen vor Beginn der Gallery 08 Auffahrung



Berechnete und gemessene Porendruckentwicklung während der Gallery 08 Auffahrung



Weitere In-situ-Messungen / Modellierung



Offene Fragen und geplante Weiterarbeit

Vereinfachungen bei den bisherigen Berechnungen

- Tongestein rein elastisch, ohne viskoplastisches Materialverhalten und ohne Schädigung
- Entsättigung durch negative Porendruckrandbedingung
- Keine Quellung/Schrumpfung

In CODE_BRIGTH ist mit dem sogenannten Argillite-Modell ein Stoffansatz implementiert, der Schädigung und Quellung/Schrumpfung berücksichtigen kann, aber

- Keine hinreichende Dokumentation
- Keine Verheilung

Geplante Weiterarbeit

- Eigene Erweiterung der Stoffmodelle zur Schädigung und Verheilung von Tonstein („Dichtekolloidmodell“): Verbindung von Ton- und Mineralpartikeln durch adsorbiertes Wasser
- Verifikation des Ansatzes durch geeignete Experimente

Danksagung

Das Projekt THERESA wurde von der Kommission der Europäischen Gemeinschaft unter der Vertragsnummer FP6-036458 und vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie unter dem Förderkennzeichen 02 E 10236 gefördert.

Das Projekt THM-Ton wird vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie unter dem Förderkennzeichen 02 E 10377 gefördert.

Die Autoren danken für die Unterstützung.

Weiterer Dank geht an die Schweizer Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (Nagra) und an das Schweizer Bundesamt für Landestopografie (Swisstopo) für die erfolgreiche und angenehme Zusammenarbeit im Untertagelabor Mont Terri.

Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle
in tiefen geologischen Formationen

9. Projektstatusgespräch

Projektträger Karlsruhe im KIT, 15.-16. Juni 2010

Vergleich aktueller Stoffgesetze für Steinsalz
anhand von 3D-Modellberechnungen



Dr. Andreas Hampel





Förderkennzeichen	Projektpartner
02C1577	Dr. Andreas Hampel (AH), Wissenschaftlicher Berater, Mainz
02C1587	Institut für Gebirgsmechanik GmbH (IfG), Leipzig
02C1597	Institut für Nukleare Entsorgung (INE) Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
02C1607	Institut für Unterirdisches Bauen (IUB) Leibniz Universität Hannover
02C1617	Technische Universität Clausthal (TUC), Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik, Clausthal-Zellerfeld





Verbundprojekte zum Vergleich von Stoffgesetzen für Steinsalz

Projekt 1, Laufzeit 01.04.2004 – 30.11.2006:

Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz:
Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen



Projekt 2, Laufzeit 01.08.2007 – 31.07.2010:

Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von
3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten
eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz





Förderkonzept des BMBF

Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen
(1997-2001)

B. Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Untertagedeponien

B2 Verhalten von Wirtsgesteinsformationen

B2.1-C Untersuchung und Modellierung des geomechanischen Verhaltens von Salzgesteinen unter Berücksichtigung von Bruch und Rissbildungen (...)

B2.2-C Untersuchungen zur Hohlraumkonvergenz und Weiterentwicklung der Konvergenzmodelle (...)

B4 Verhalten von geotechnischen Barrieren

B4.2-C Entwicklung und Erprobung von Verfahren zur Beurteilung des langfristigen Verhaltens von Auflockerungszonen (...)

B7 Validierung von Modellen, Unsicherheitsanalyse

B7.1-C Anwendung existierender oder Entwicklung geeigneter Methoden und Verfahren für die Validierung von Modellen zur Beschreibung geomechanischer(,) [und] hydrogeologischer (...) Effekte im Nahbereich und im Wirtsgestein





Ziele der Verbundprojekte

- Dokumentation aktueller Stoffgesetze und Verfahren zur Bestimmung von Kennwerten der Stoffgesetzparameter für verschiedene Salztypen (Laborversuche, In-situ-Messungen)

- Vergleich der Stoffgesetze anhand ausgewählter Benchmark-Modellberechnungen:

Projekt 1: Detaillierte Überprüfung und Vergleich der Stoffgesetze:
Modellierung der wichtigen Verformungsphänomene im Steinsalz
(Nachrechnungen verschiedenartiger Laborversuche,
2D-Simulationsberechnungen einfacher, typischer Untertagesituationen)



Projekt 2: Detaillierte Überprüfung und Vergleich der Stoffgesetze:
Anwendung in 3D-Simulationen einer komplexeren realistischen Struktur,
Vergleich der Ergebnisse untereinander und mit In-situ-Messdaten
(3D-Simulationsberechnungen eines realen Grubenausschnitts)

- Aufzeigen von Perspektiven für die Weiterentwicklung der Stoffgesetze

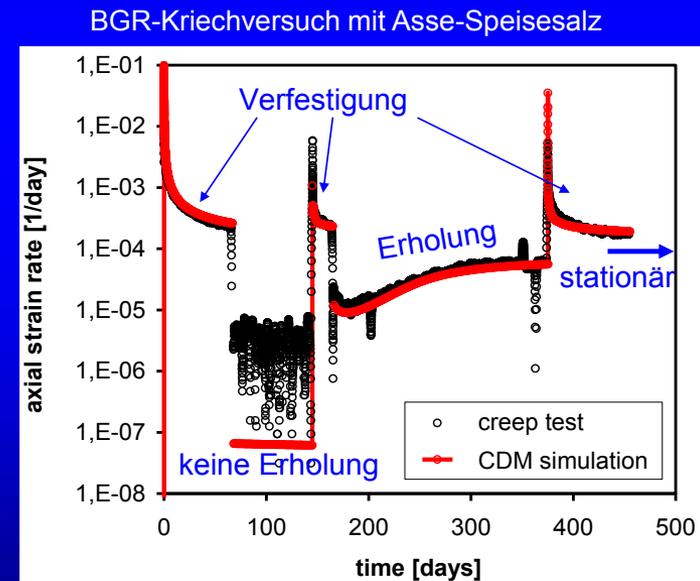
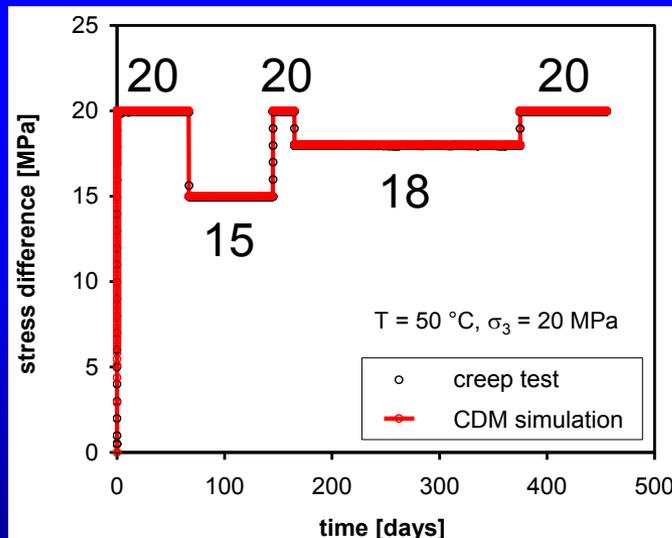




Stoffgesetze zur Beschreibung folgender gekoppelter Phänomene im Steinsalz

Im kompakten, ungeschädigten Steinsalz:

- Transientes Kriechen nach Spannungserhöhungen (Verfestigung)
- Transientes Kriechen nach Spannungsreduktionen (Erholung)
- Stationäres (Langzeit-) Kriechen

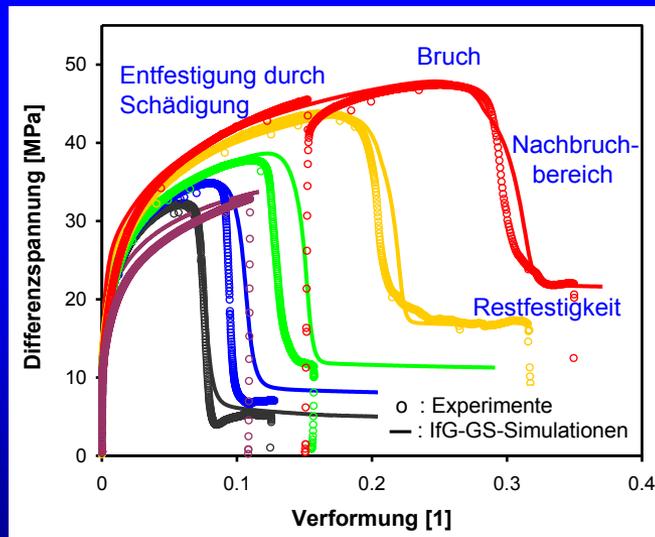




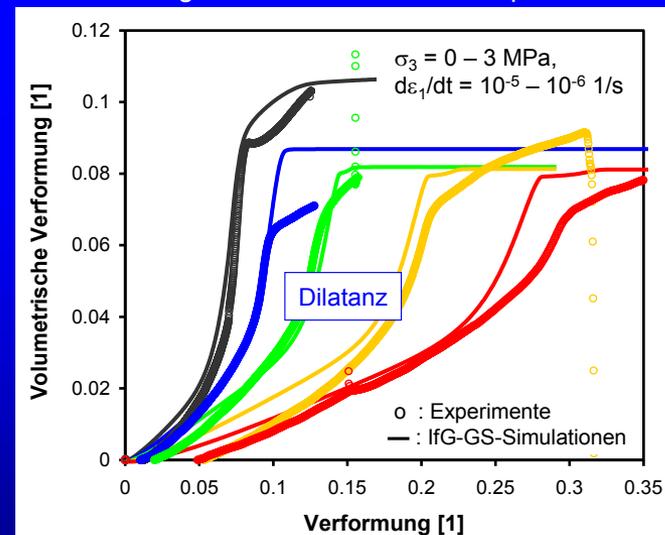
Stoffgesetze zur Beschreibung folgender gekoppelter Phänomene im Steinsalz

Oberhalb der Dilatanzgrenze, d. h. bei höheren Differenzspannungen:

- Entwicklung von Schädigung und Dilatanz (Auflockerung), Verformungseinfluss
- (Kurzzeit-)Versagen und (Langzeit-)Kriechbruch
- Nachbruchverhalten und Restfestigkeit
- Zusammenhang zwischen Schädigung, Porosität und Permeabilität



BGR-Festigkeitsversuche mit Asse-Speisesalz



BGR-Versuch 99073

Simulation von 99073

BGR-Versuch 99071

Simulation von 99071

BGR-Versuch 99070

Simulation von 99070

BGR-Versuch 99073

Simulation von 99073

BGR-Versuch 99071

Simulation von 99071

BGR-Versuch 99070

Simulation von 99070



Dr. Andreas Hampel



Vergleich aktueller Stoffgesetze für Steinsalz anhand von 3D-Modellberechnungen



**Stoffgesetzliche Beschreibung des mechanischen Verhaltens
ist auch Grundlage für die Modellierung ...**

- ... der thermisch-hydraulisch-mechanischen Kopplung
- ... des Einflusses von Gas- oder Flüssigkeitsdrücken auf die
Öffnung und den Fortschritt von Rissen im Steinsalz
- ... der Verheilung von Rissen im Steinsalz
(Schädigungsrückbildung unterhalb der Dilatanzgrenze
=> Abnahme der Permeabilität)





Berücksichtigte Stoffgesetze

Partner	Stoffgesetz	Unterschiedliche Modellvorstellungen
Hampel (AH)	CDM	Verformungsabh. Mikrostrukturentwicklung, Wechselwirk. von Versetzungen mit Hindernissen; Dilatanz und Schädigung: kriechabhängig
IfG Leipzig	Modell Günther/Salzer	Phänom.-makrosk. Beschreibung der Verfestigung und Erholung; Dilatanz/Schädigung: & Entfestigung
	Modell Minkley	Elasto-visko-plastisches Modell (Kriechen: rheologisch mit Kelvin-, Maxwellelement => transient: zeitabh., stationär: Exp.-Ansatz)
INE des KIT	KIT-Modell	Elasto-visko-plastisches Modell (trans. Kriechen: zeitabh., stationär: Potenzansatz)
TU Clausthal	Stoffgesetz Hou/Lux	Visko-elastisches Modell: trans. Kriechen: deform.-abh., stationär: Exp.-Ansatz Add. Überlag. schädigungsinduz. Verformungsraten
IUB der Uni Hannover	Lubby2-MDCF	Visko-elastisches Modell: trans. Kriechen: zeitabh., stationär: Exp.-Ansatz; Add. Überlag. schädigungsinduz. Verformungsraten



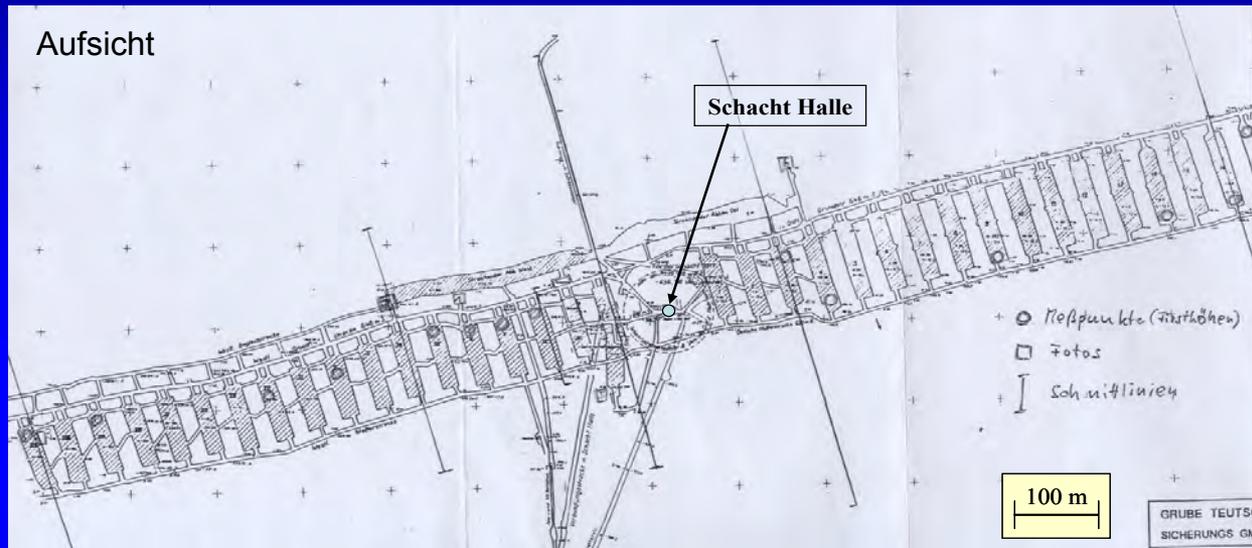


Verwendete numerische Rechenprogramme

Partner	Rechenprogramm	Methode
Hampel (AH)	FLAC-3D	Finite Differenzen
IfG Leipzig		
IUB der Uni Hannover		
TU Clausthal		
INE des KIT	ADINA	Finite Elemente



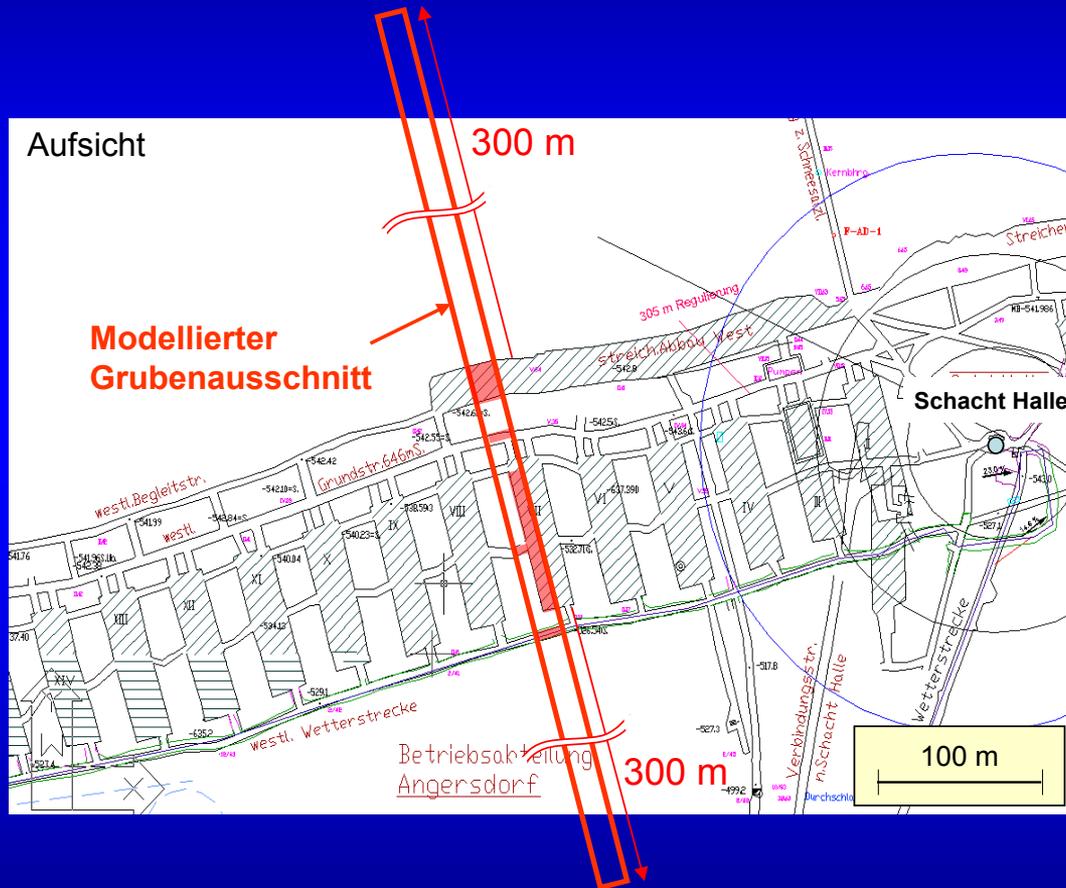
Grube Angersdorf: Gegenstand der 3D-Benchmark-Berechnungen

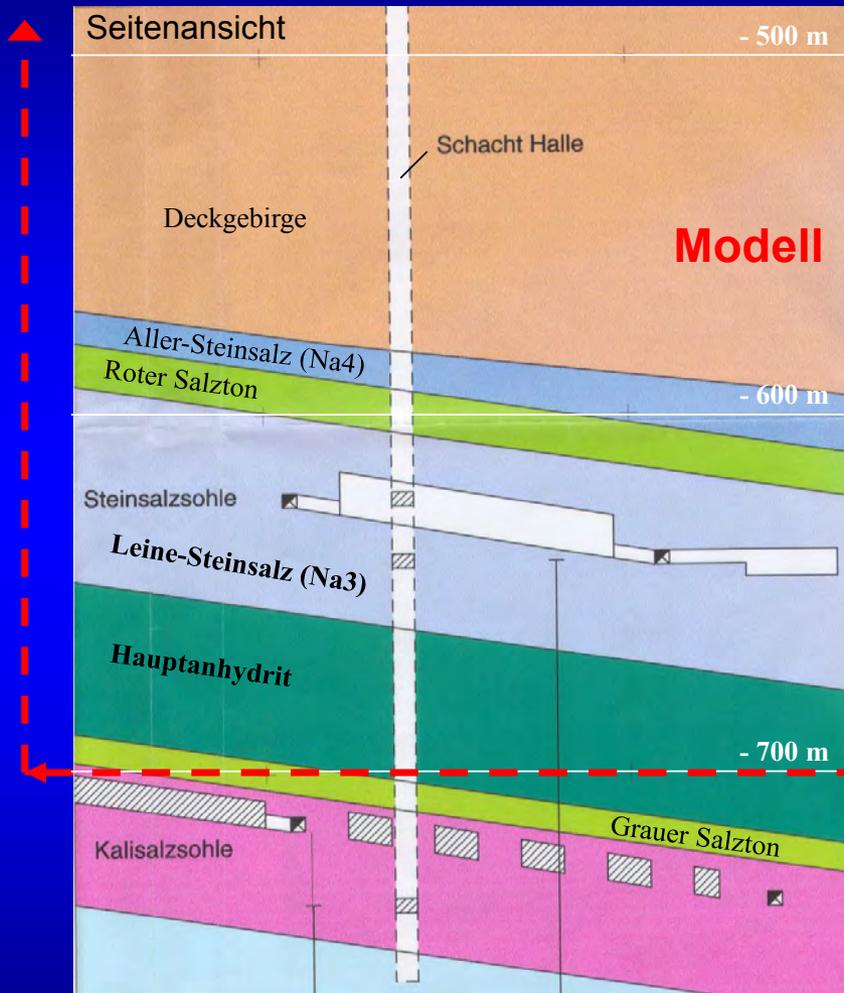


- Regelmäßige Geometrie
=> Grubenausschnitt modellieren
- Labordaten vorhanden,
weitere Probennahme möglich
=> Kennwertbestimmung der
Stoffgesetzparameter
- In-situ-Messdaten vorhanden zur
Tagesoberflächensenkung
=> Anpassung einzelner
Stoffgesetzparameter
- Weitere In-situ-Messungen im
Projekt möglich
=> Vergleich der Ergebnisse
- Grube ist nicht
Gegenstand eines
laufenden Verfahrens
=> Projektergebnisse
publizierbar



Grube Angersdorf (Ausschnitt): Gegenstand der 3D-Benchmark-Berechnungen





3D-Simulationsberechnungen

- 50 Jahre nach der Auffahrung:
Zeitpunkt „heute“
- 100 Jahre nach der Auffahrung:
„Prognose“
- danach üblicherweise Verfüllung
(nicht Gegenstand des Projekts)

Auffahrung der Abbaue
im Leine-Steinsalz: 1928 – 1966

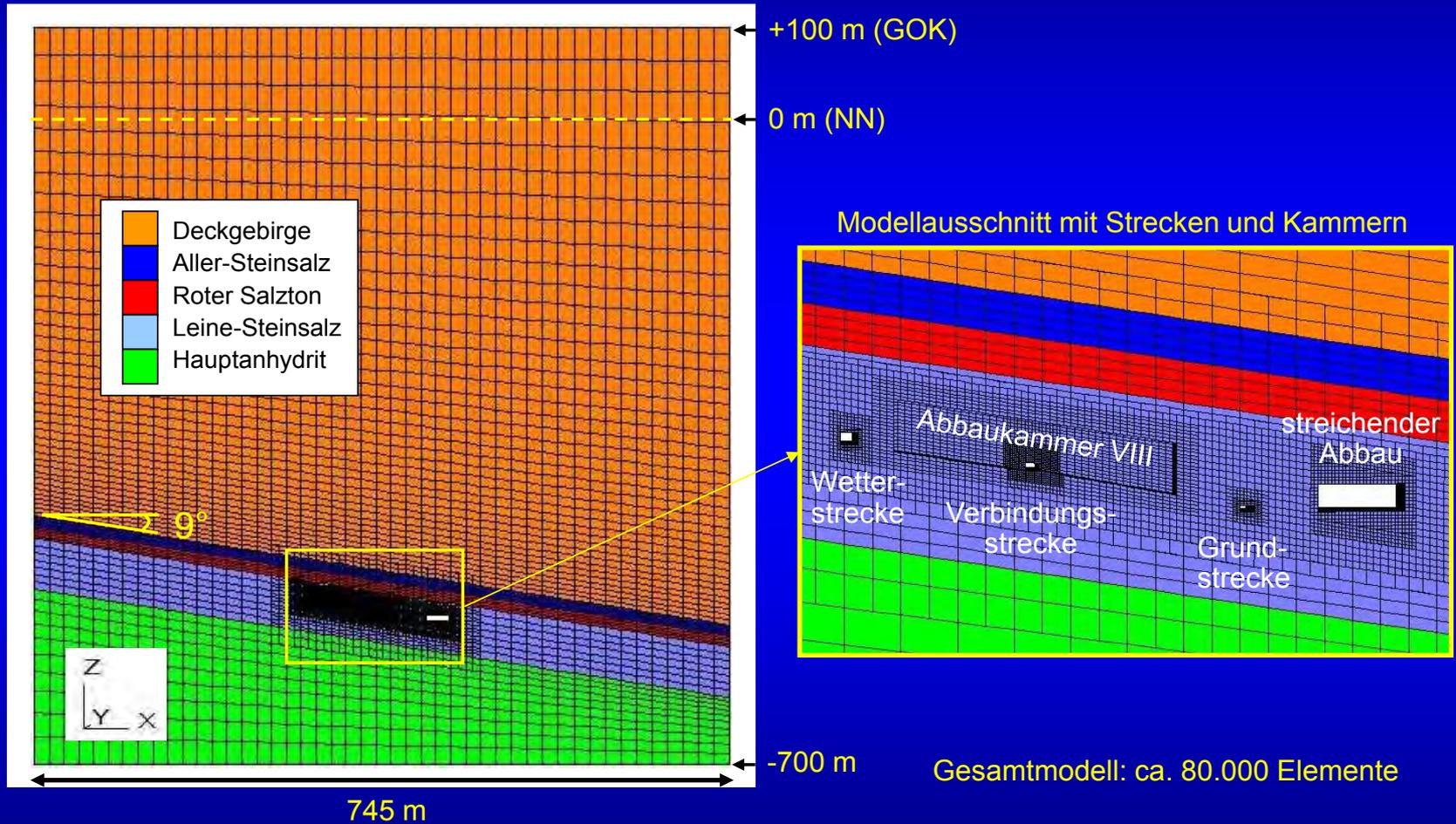
=> heute: 50 Jahre nach
Abschluss der Auffahrungen
im Leine-Steinsalz

Kali-Abbau: 1911 – 1927
(nicht modelliert)





Modell Grubenausschnitt Angersdorf (Beispiel: Hampel)





Modell Grubenausschnitt Angersdorf

Einheitliche Vorgaben:

Schicht		Modell	ρ [t/m ³]	K [GPa]	G [GPa]	E [GPa]	ν [-]	c [MPa]	ϕ [°]	σ_z [MPa]	A [d ⁻¹]	n
Deckgebirge		MC	2,60	5,9	2,3	6,0	0,33	0,5	30	0		
roter Salzton	T4	Norton	2,30	7,5	4,0	10,2	0,27				1,60E-06	1
Hauptanhydrit	A3	Elastisch	2,90	40,0	24,0	60,0	0,25					
Steinsalz	Na3-Na4		2,15	16,7	10,0	25,0	0,25					



Grundspannungszustand: $\sigma_{zz} = 9,81 \text{ m/s}^2 * \rho * z$

Seitendruckbeiwert: k_0 mit $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = k_0 * \sigma_{zz}$

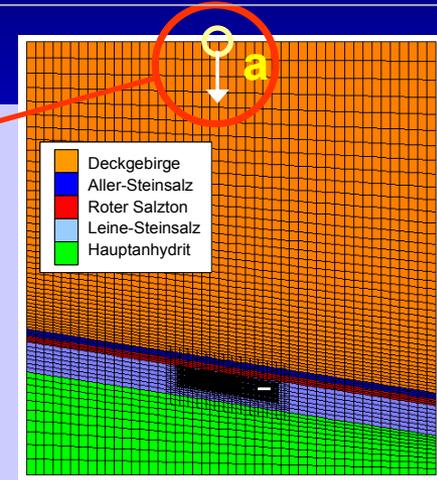
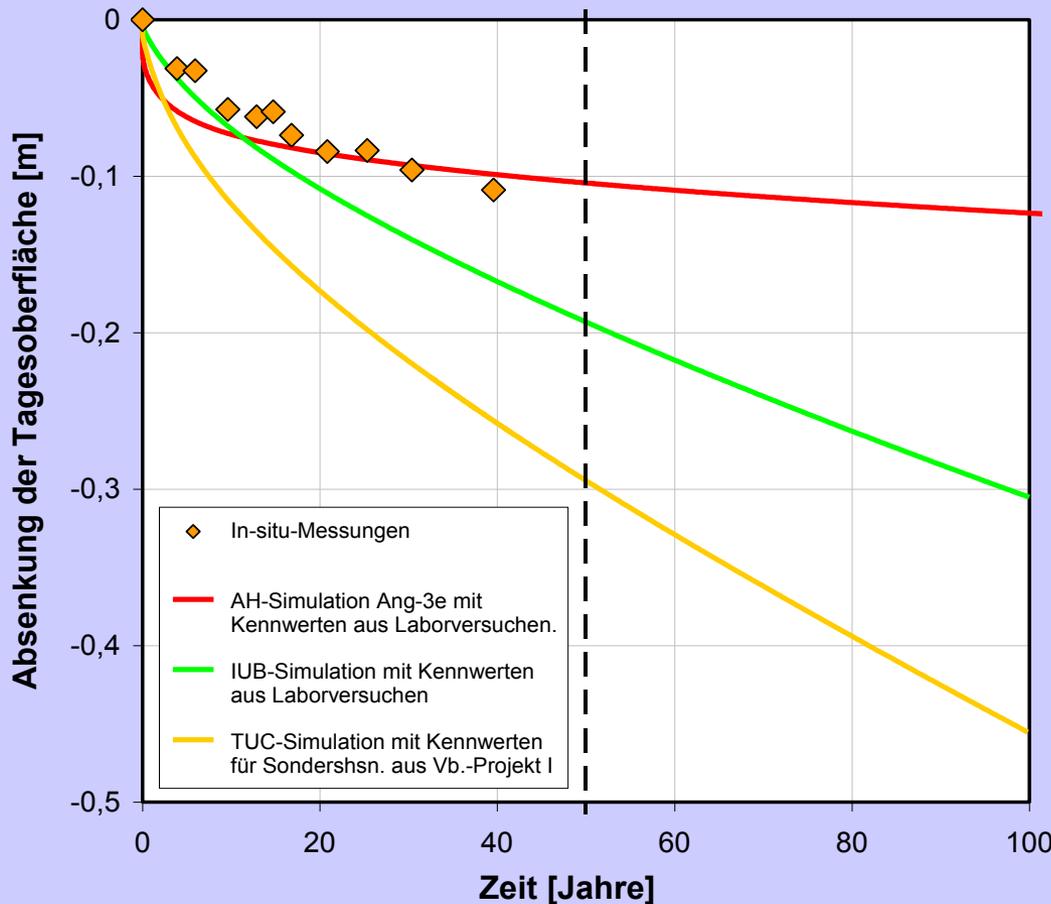
Deckgebirge: $k_0 = \nu / (1 - \nu) = 0,5$

alle anderen Schichten: $k_0 = 1$





Tagesoberflächenabsenkung über der Grube Angersdorf



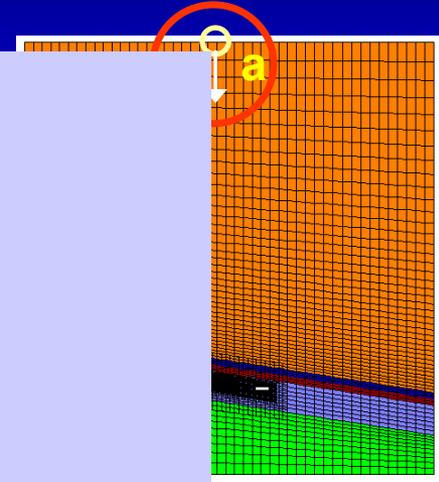
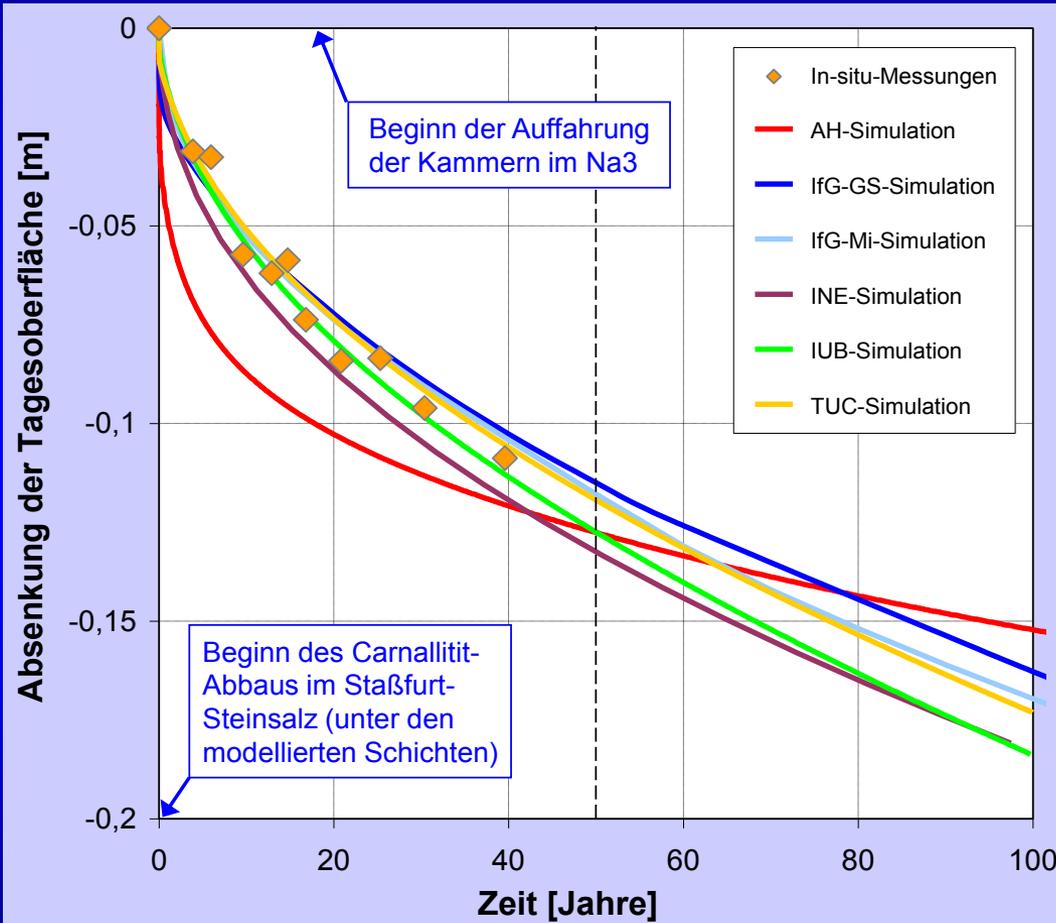
Vergleich von Simulations-
ergebnissen mit

- anhand von Laborversuchs-
ergebnissen ermittelten
Kennwerten (AH, IUB)
- Kennwerten für eine andere
Lokation (Sondershausen)
(Vb.-Projekt 1, TUC)





Tagesoberflächenabsenkung über der Grube Angersdorf

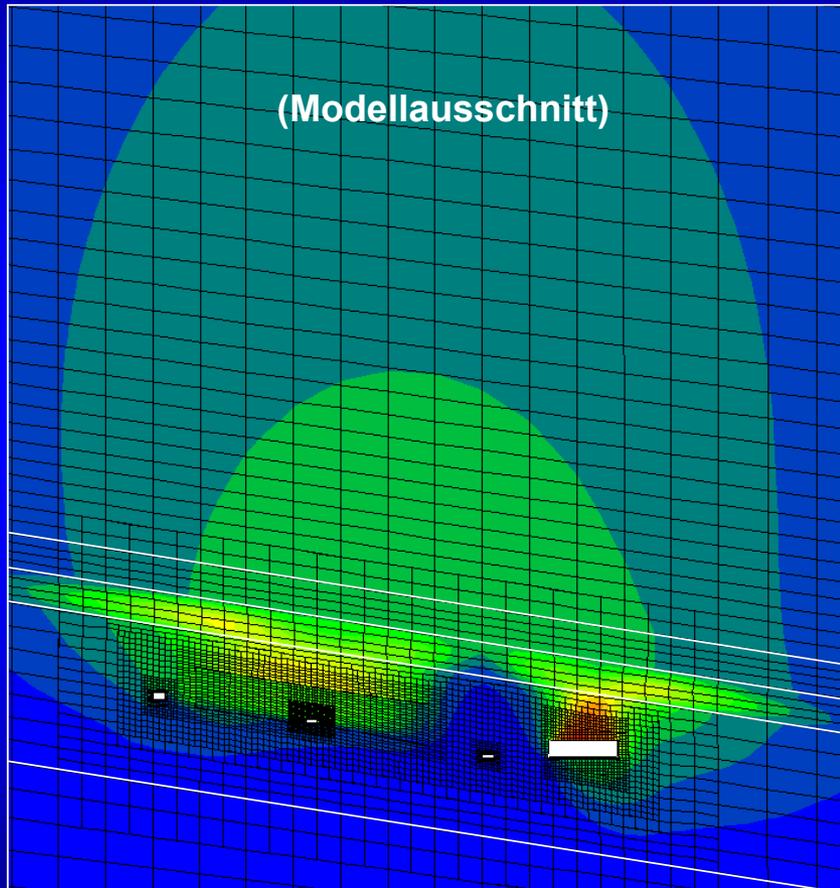


der Stoffgesetze
 gemessene
 enabsenkung
 Angersdorf
 eines Parameters
 re Kriechen)





Modell Angersdorf

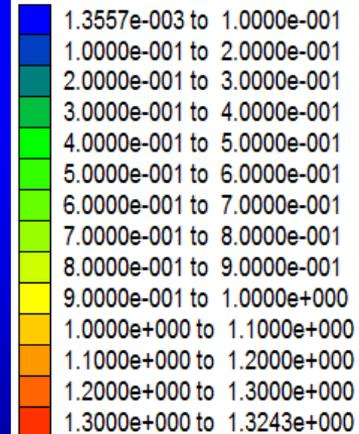


Vertikalverschiebungen [m]
nach 100 Jahren, berechnet
von Hampel mit dem CDM

Contour of Displacement Mag.

Magfac = 1.000e+000

Live mech zones shown

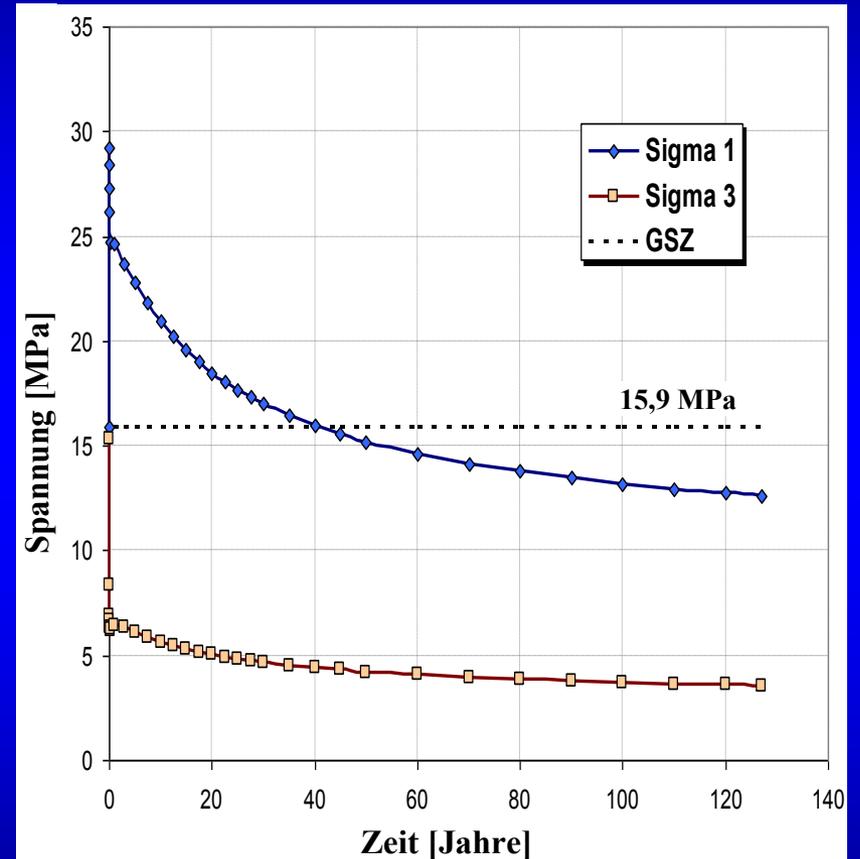
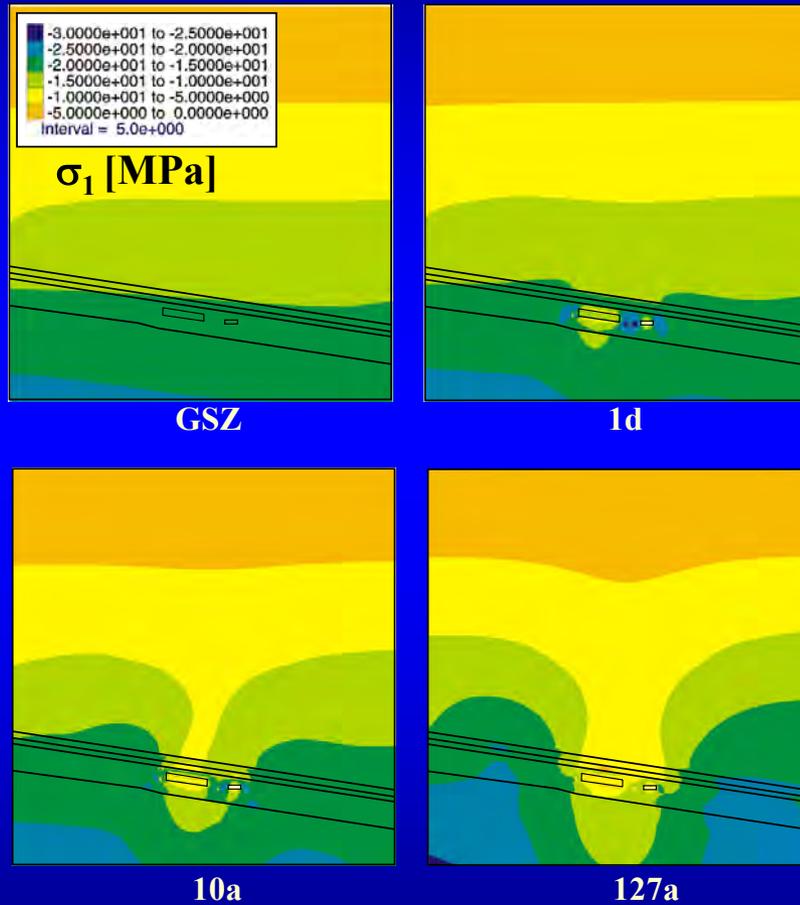


Interval = 1.0e-001



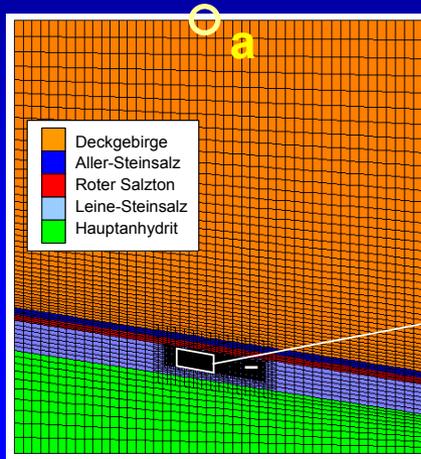


Zeitliche Entwicklung der maximalen Hauptspannung, berechnet mit dem IfG-GS-Stoffgesetz

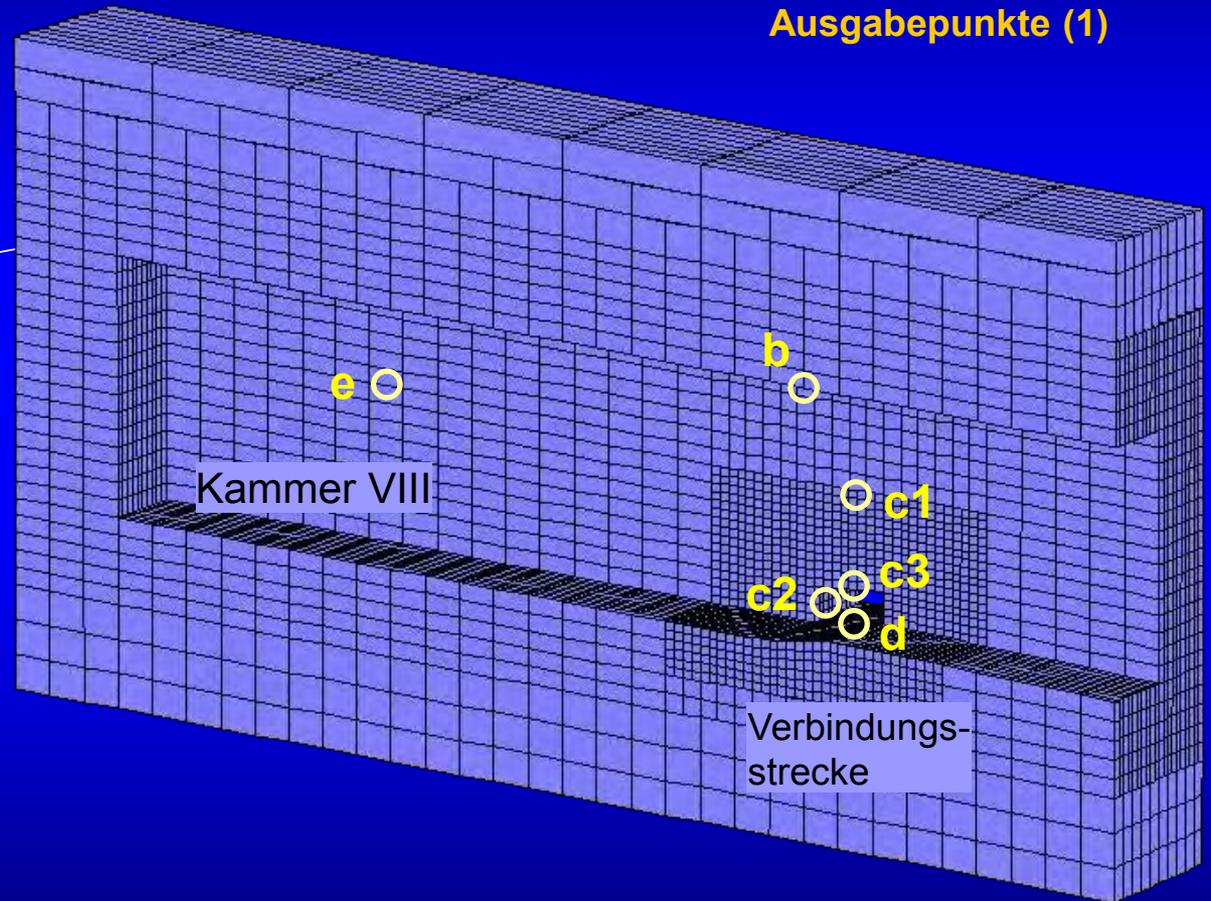


Standzeitabhängige Spannungsänderung im Pfeilerkern





Modell Angersdorf (Ausschnitt)
Ausgabepunkte (1)



Ausgabegrößen:

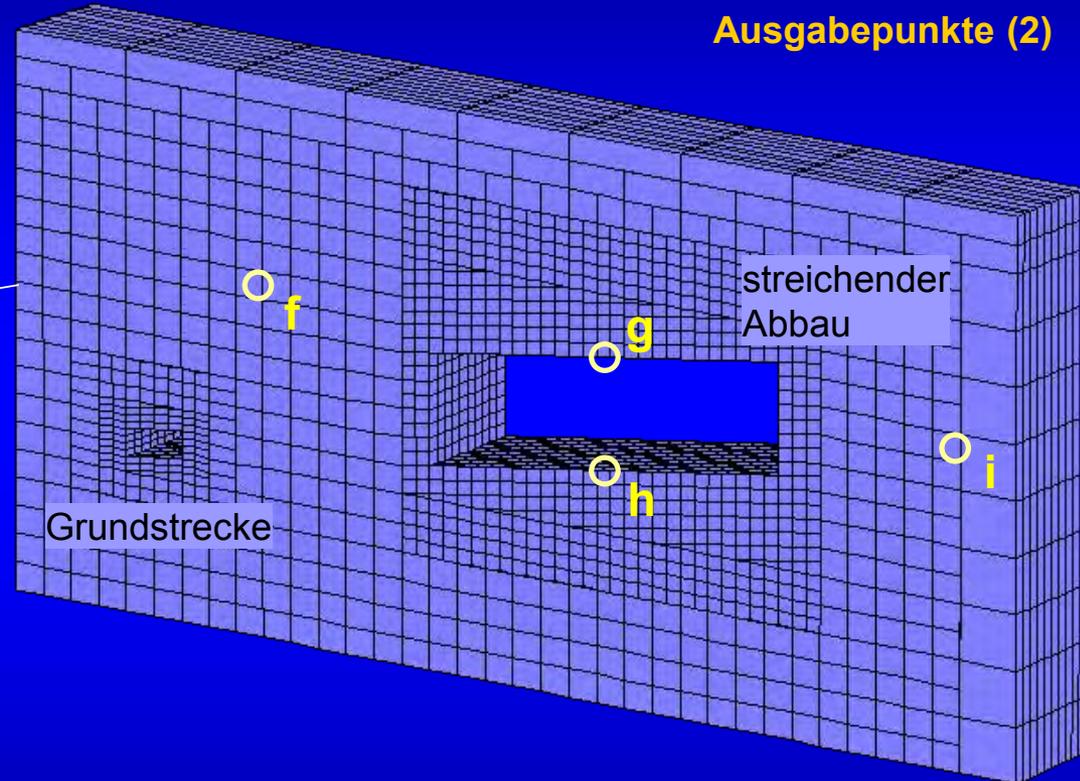
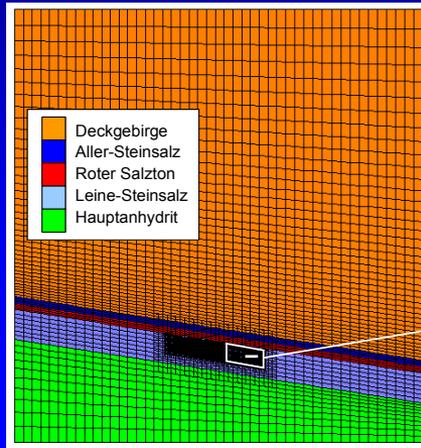
Zeitverläufe der

- Verschiebungen,
- 6 Spannungs-
komponenten
=> 3 Haupt-
spannungs-
komponenten





Modell Angersdorf (Ausschnitt)
Ausgabepunkte (2)



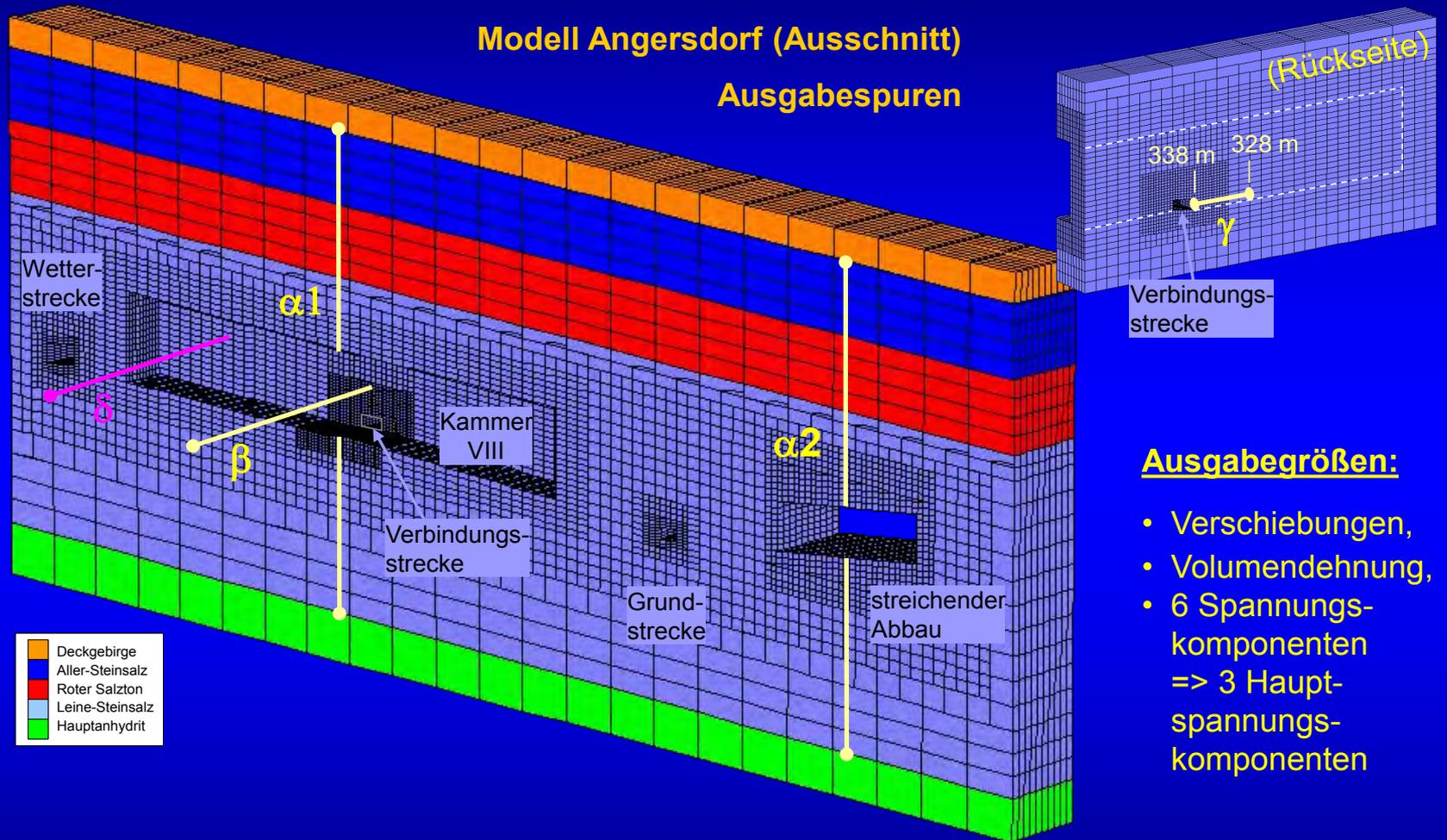
Ausgabegrößen:

- Zeitverläufe der
- Verschiebungen,
 - 6 Spannungs-komponenten
=> 3 Hauptspannungs-komponenten





Modell Angersdorf (Ausschnitt) Ausgabespuren



Ausgabegrößen:

- Verschiebungen,
- Volumendehnung,
- 6 Spannungs-komponenten
=> 3 Hauptspannungs-komponenten

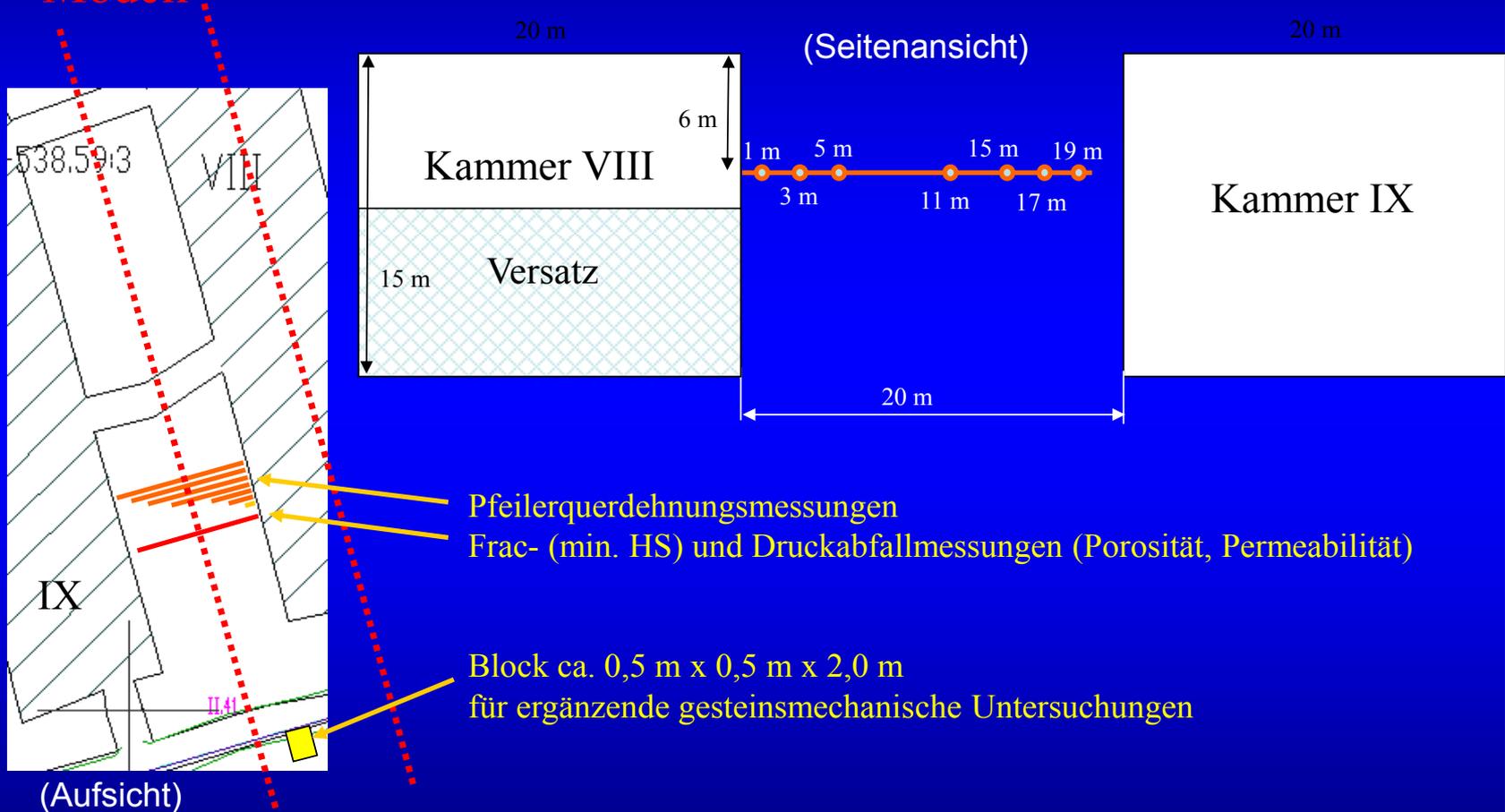
außerdem: Konturplots verschiedener Größen auf Modell- und Schnittflächen (2D, 3D)





In-situ-Messungen des IfG von Kammer VIII aus

Modell



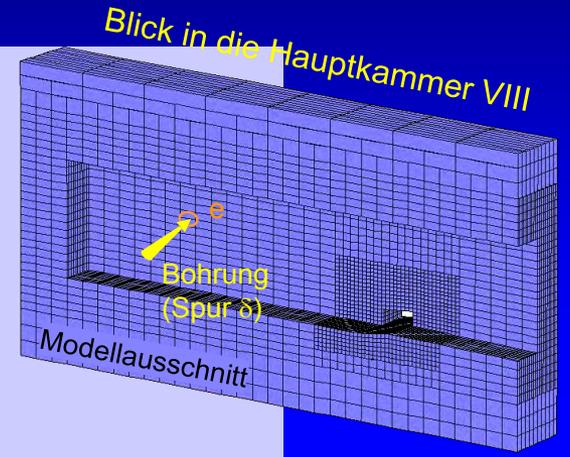
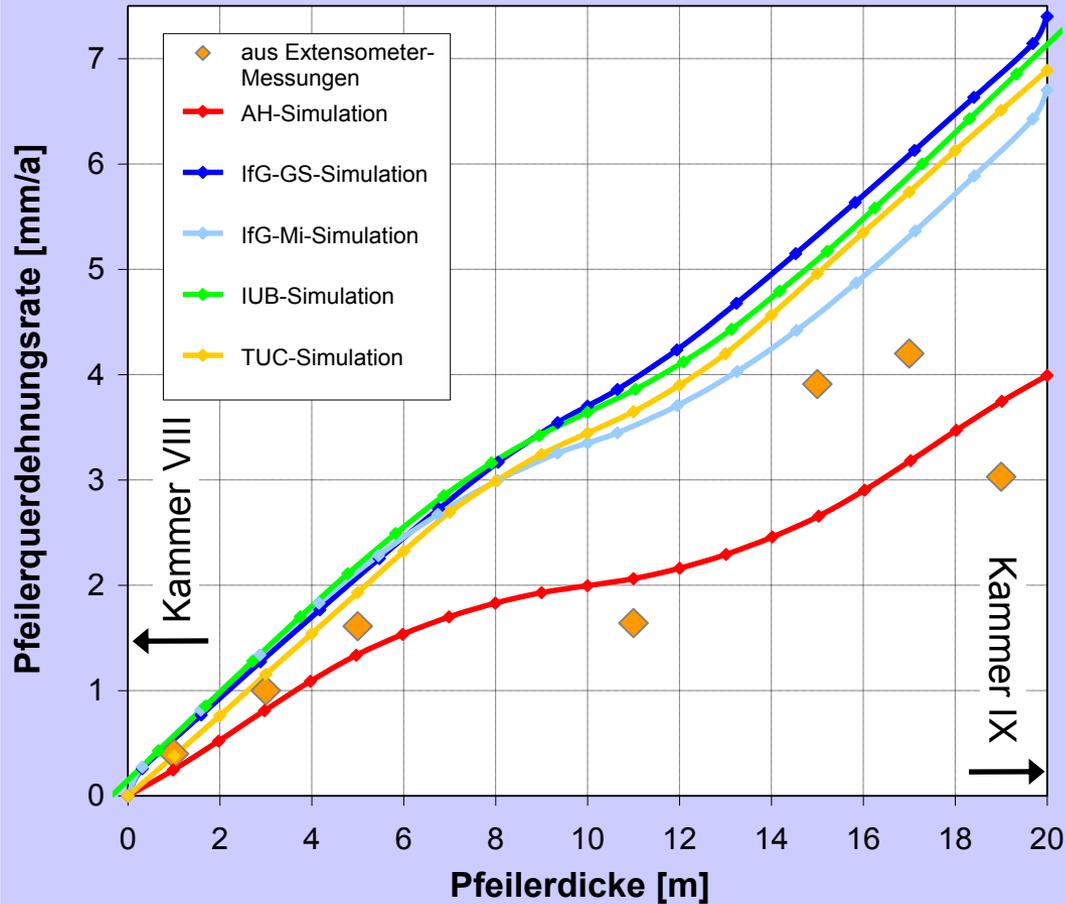
Pfeilerquerdehnungsmessungen
 Frac- (min. HS) und Druckabfallmessungen (Porosität, Permeabilität)

Block ca. 0,5 m x 0,5 m x 2,0 m
 für ergänzende gesteinsmechanische Untersuchungen





Modell Angersdorf



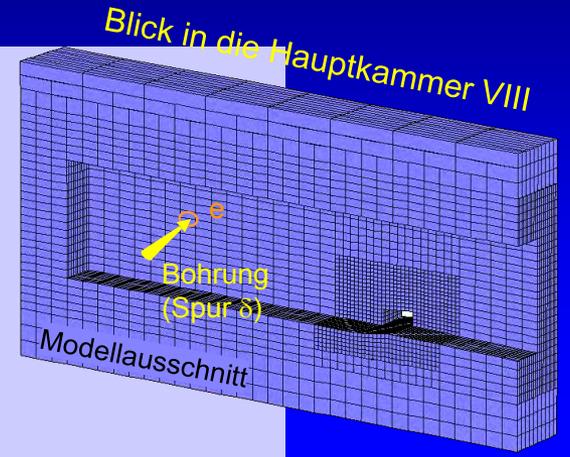
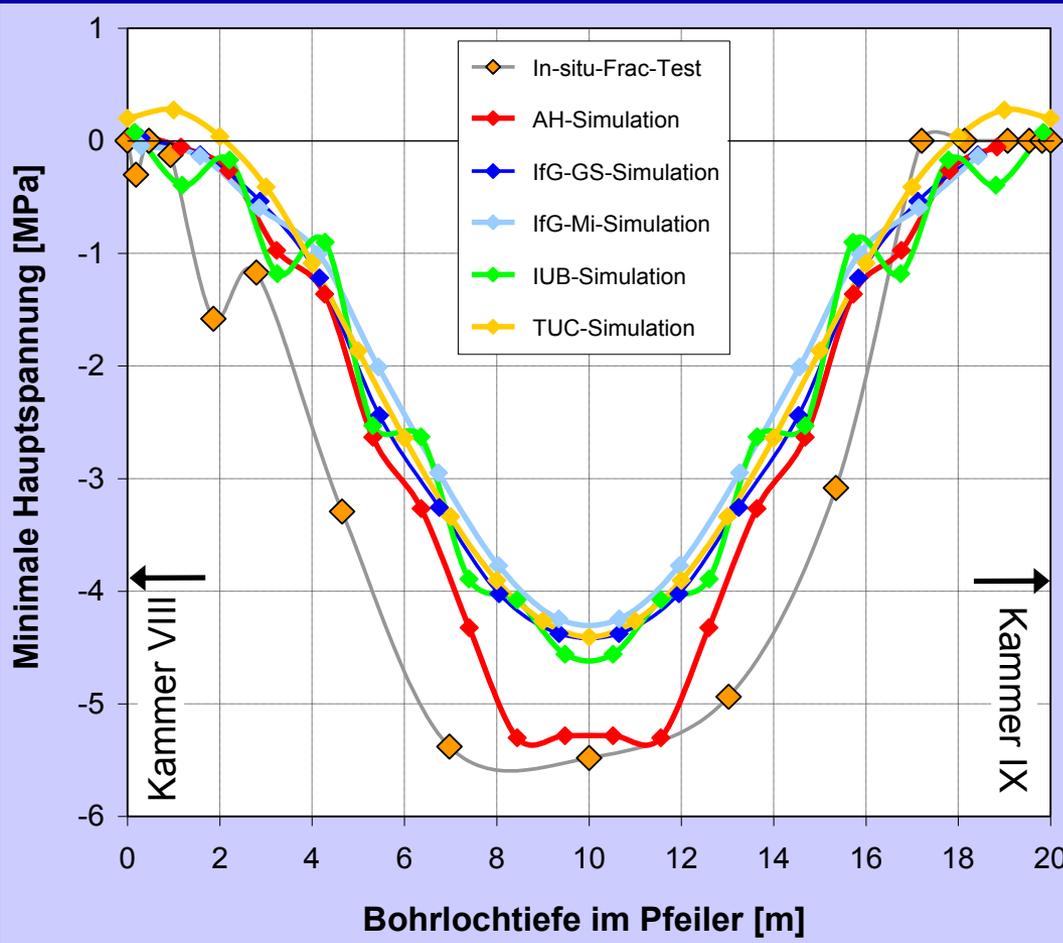
Vergleich der berechneten mit der in situ gemessenen Pfeilerquerdehnungsrate zwischen Kammer VIII + IX

Zeitpunkt:
50 Jahre nach der Auffahrung





Modell Angersdorf



Vergleich der berechneten mit der in situ gemessenen minimalen Hauptspannung im Pfeiler zwischen den Kammern VIII + IX

Zeitpunkt:
50 Jahre nach der Auffahrung



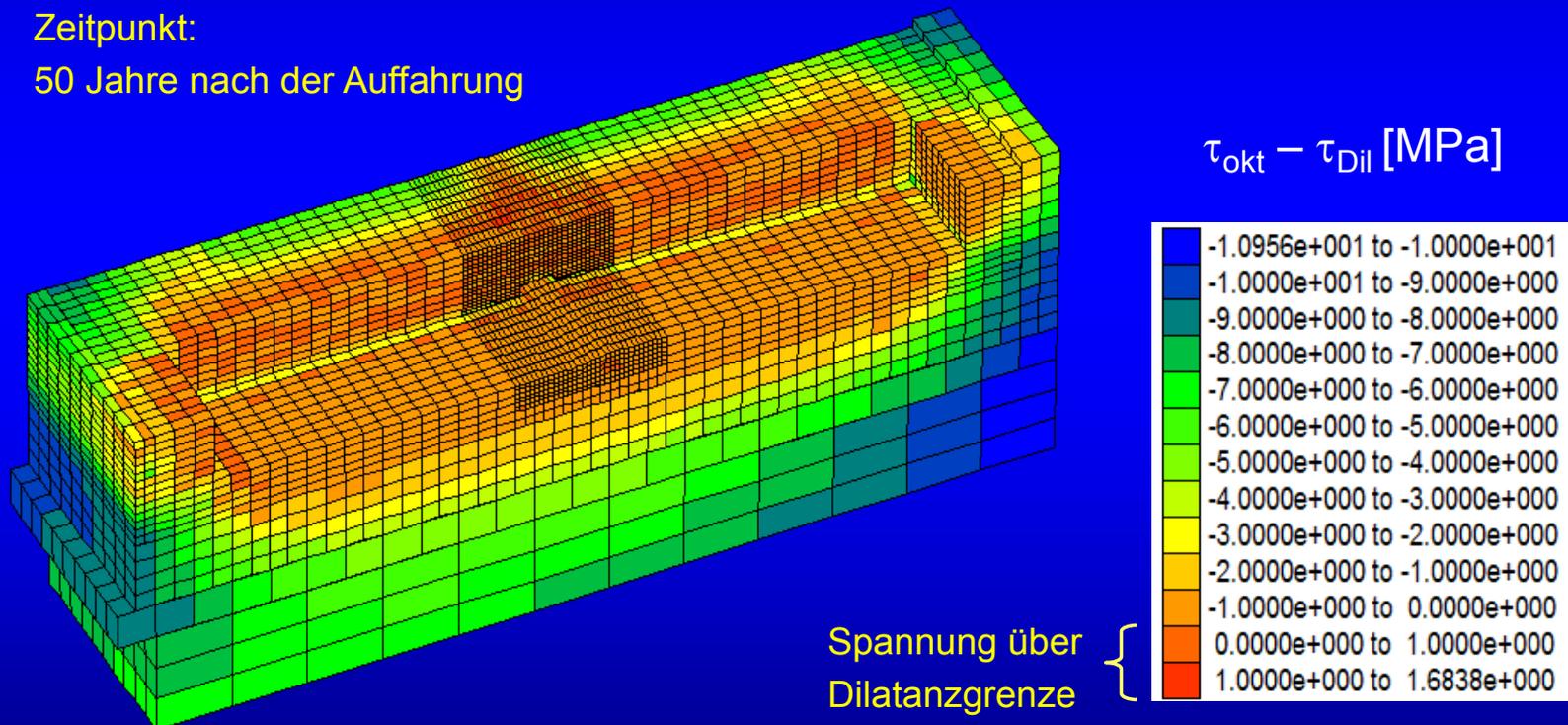


Modell Angersdorf (Ausschnitt):

Mit dem CDM von Hampel berechnete Oktaeder-Schubspannung
bezüglich der Dilatanzgrenze

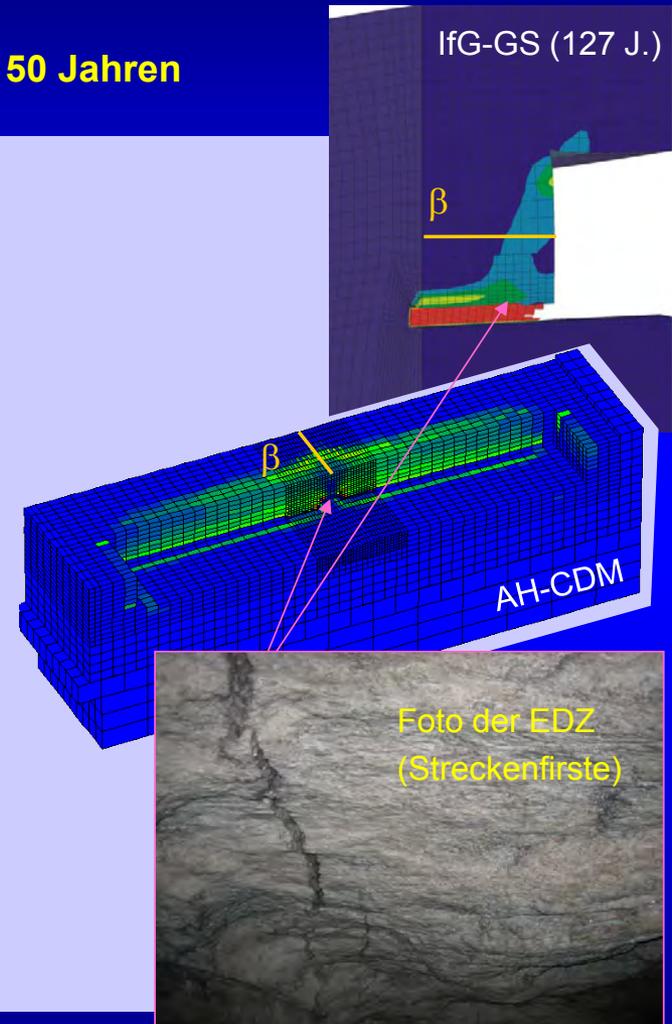
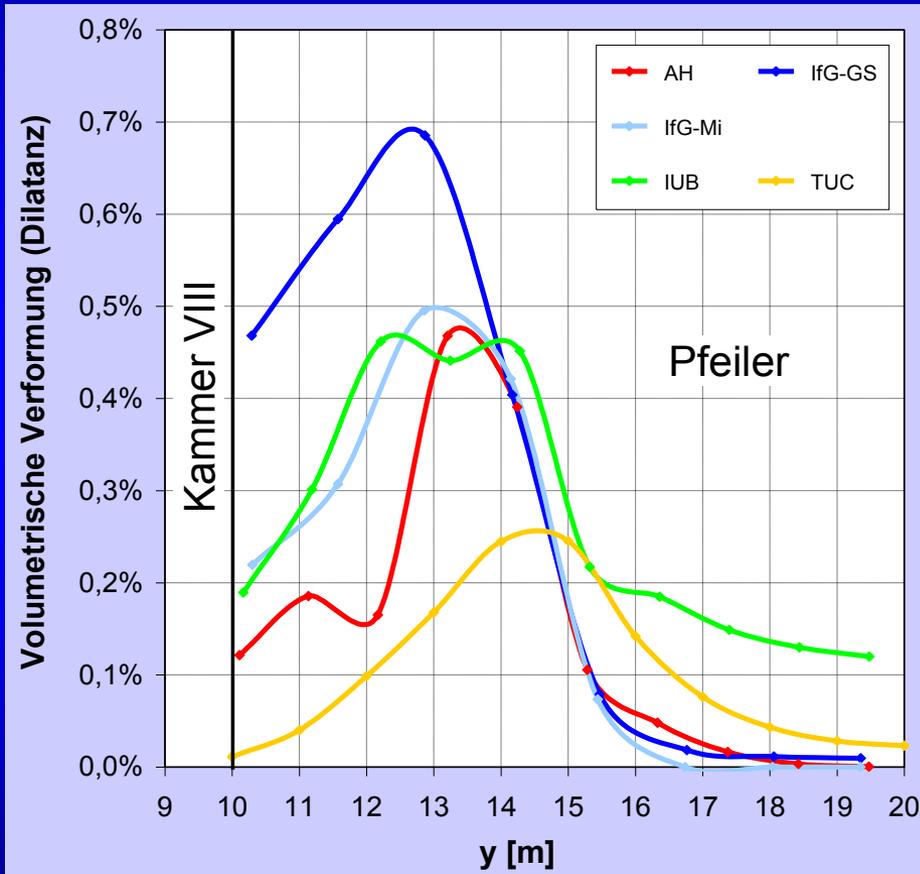
Zeitpunkt:

50 Jahre nach der Auffahrung





Dilatanz im Pfeiler des Modells Angersdorf nach 50 Jahren





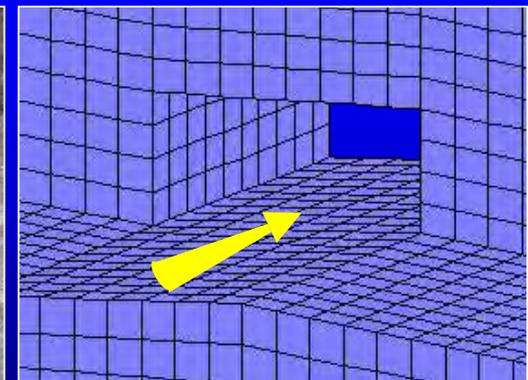
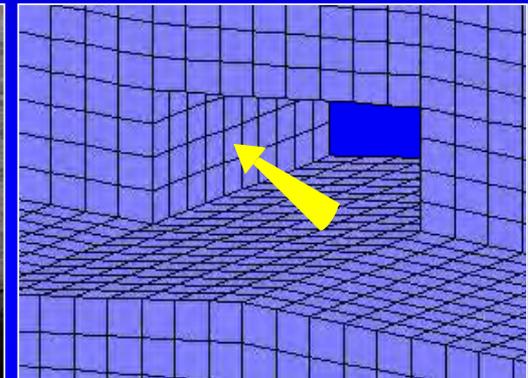
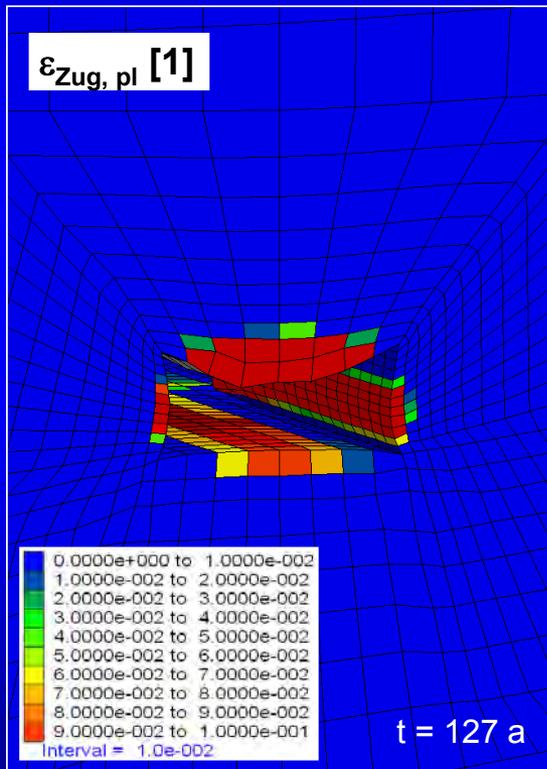
Grube Angersdorf

Mit dem IfG-Minkley-Stoffgesetz
berechnete plastische
Zugverformung

Verbindungsstrecke

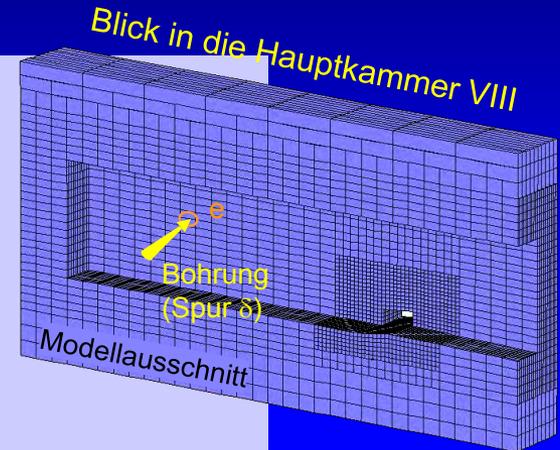
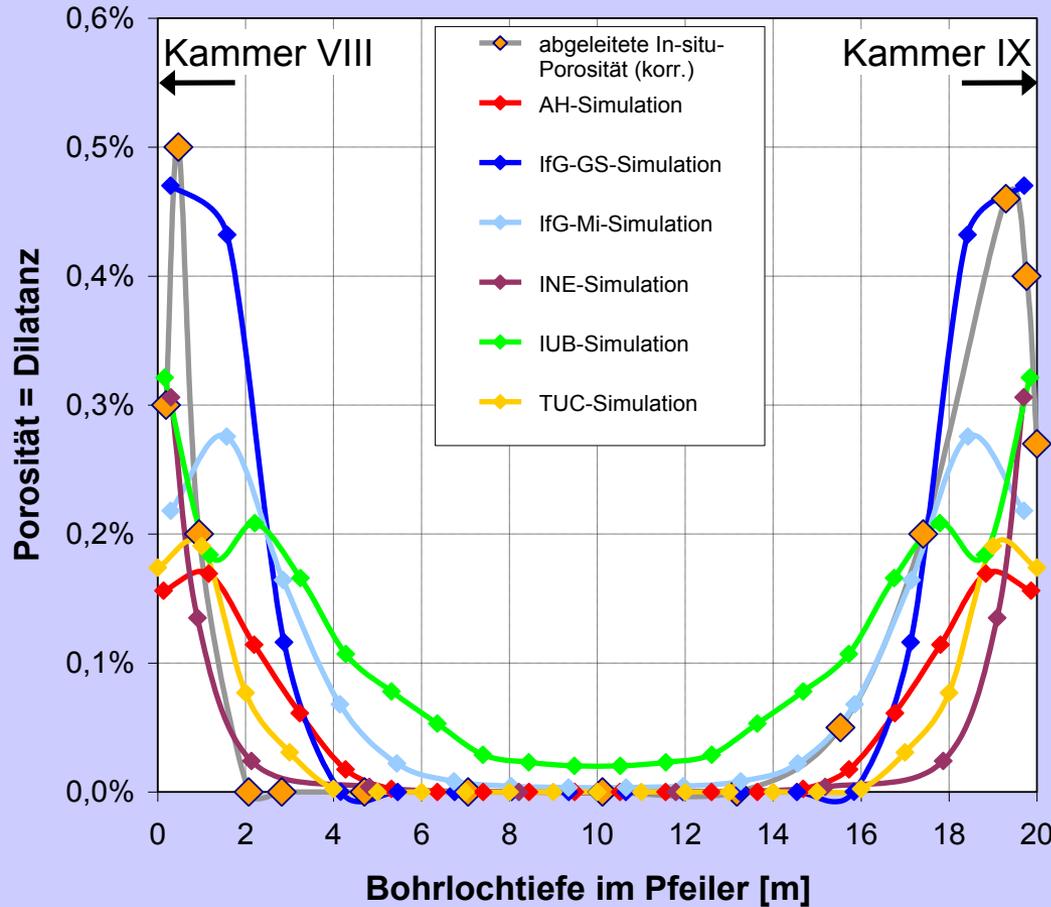
Fotos der EDZ

Blickwinkel





Modell Angersdorf



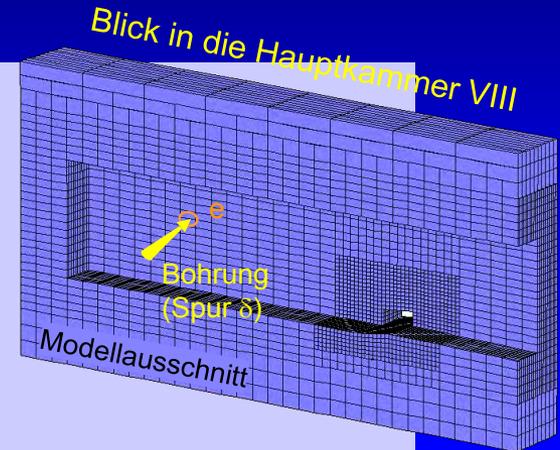
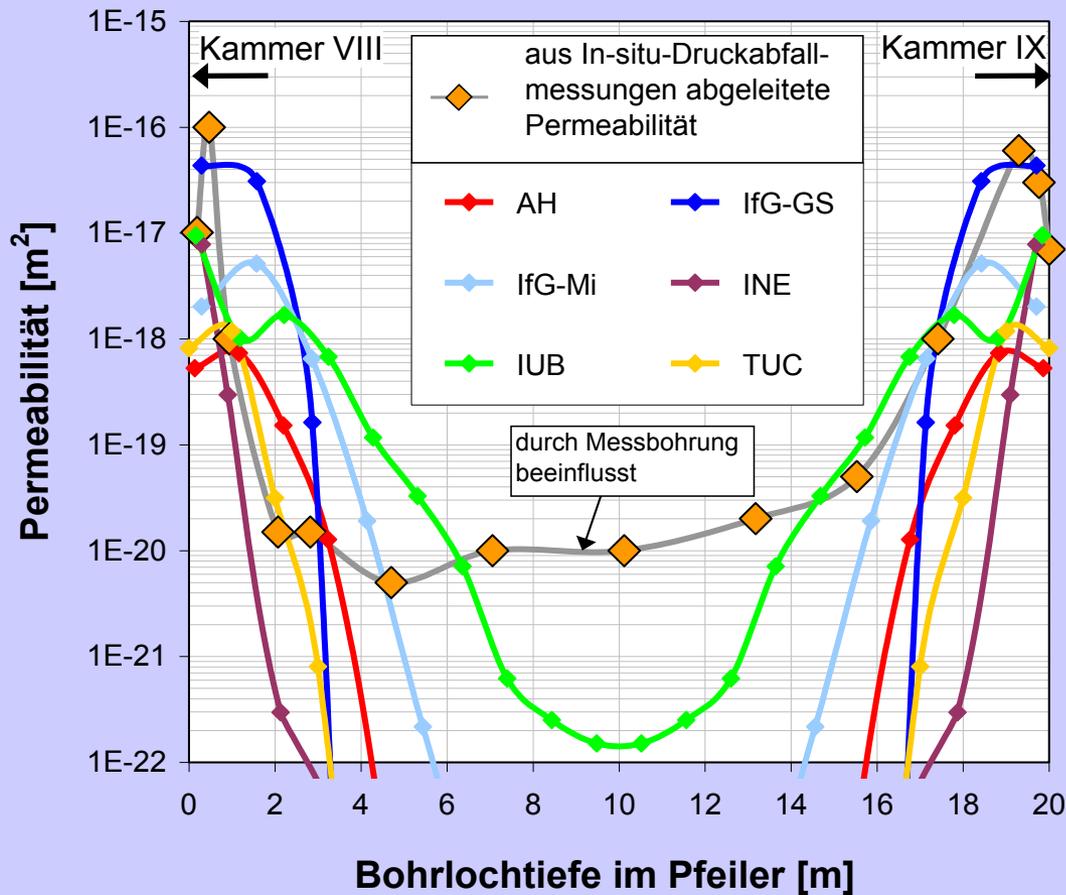
Vergleich der berechneten Dilatanz mit der aus In-situ-Druckabfallmessungen abgeleiteten Porosität (korr.) im Pfeiler zwischen den Kammern VIII + IX

Zeitpunkt:
50 Jahre nach der Auffahrung





Modell Angersdorf



Vergleich der berechneten Permeabilitäten mit der aus In-situ-Messungen abgeleiteten, durch die Messbohrung beeinflussten Permeabilität im Pfeiler zwischen den Kammern VIII + IX

Zeitpunkt:
50 Jahre nach der Auffahrung





Zusammenfassung

Aktuelle Stoffgesetze für das geomechanische Verhalten von Steinsalz ...

- ... wurden entwickelt auf der Grundlage einer breiten Datenbasis (Labor / In situ) und unterschiedlichen theoretischen Modellvorstellungen:
 - Modellierung der Mikrostrukturentwicklung
 - Makroskopisch-phänomenologische Beschreibung der Verformungsmechanismen
 - Kontinuumsmechanik (rheologische Körper)

- ... sind implementiert in unterschiedliche numerische Rechencodes (FDM, FEM)





Schlussfolgerungen aus dem Stoffgesetzvergleich in den beiden BMBF-Verbundprojekten (2004-2010) (1)

Aktuelle Stoffgesetze für das geomechanische Verhalten von Steinsalz ...

- ... haben einen hohen Entwicklungsstand erreicht. Sie beschreiben erfolgreich
 - transientes und stationäres Kriechen, Entwicklung von Dilatanz und Schädigung, Kurzzeitversagen, Kriechbruch, Nachbruchverhalten, Restfestigkeit
 - die relevanten Verformungsphänomene unter verschiedenen Randbedingungen (Auflasten, minimalen Hauptspannungen, Verformungsraten)

- ... zeigen unterschiedliches Vermögen, einen Salztyp mit einem einzigen universellen Kennwertsatz für alle möglichen Randbedingungen zu beschreiben.





Schlussfolgerungen aus dem Stoffgesetzvergleich in den beiden BMBF-Verbundprojekten (2004-2010) (2)

- Alle Stoffmodelle sind grundsätzlich für 3D-Simulationen einer realen, stärker beanspruchten Untertagestruktur einsetzbar.
- Ermittlung salztypspezifischer Kennwerte der Stoffmodellparameter:
 - Für eine zuverlässige Prognose wird eine ausreichende Anzahl verlässlicher, standortbezogener und verschiedenartiger Laborversuche benötigt.
(-> alle Verformungsphänomene unter definierten Bedingungen)
 - Für eine weitere Verbesserung der Prognosesicherheit müssen einzelne Stoffgesetzparameter an In-situ-Messdaten angepasst werden.
- Die Stoffmodellauswahl und Modellierung sollte aufgabenorientiert erfolgen. Erfahrung und Vorgehensweise der Anwender sind von großer Bedeutung.





Schlussfolgerungen aus dem Stoffgesetzvergleich in den beiden BMBF-Verbundprojekten (2004-2010) (3)

Studie zur Vernetzungsabhängigkeit von Simulationsergebnissen:

- Die Modelldiskretisierung muss bei jedem Stoffgesetz aufgabenspezifisch mit Blick auf die zu erwartenden Verformungsphänomene erfolgen:
 - Schädigungsfreies Kriechen => relativ grobe Vernetzung reicht
(z. B. 6x6 Elemente in einem halben Pfeiler mit Schlankheitsmaß 1)
 - (Höhere) Dilatanz und Schädigung => Grobe Vernetzung beeinflusst Ergebnisse, feinere Vernetzung im Nahfeld untertägiger Hohlräume notwendig!
(Empfehlung: $\geq 8 \times 11$ Elemente im halben Pfeiler mit Schlankheitsmaß 1)
 - Große Gradienten im Nahfeld untertägiger Hohlräume => Feinere Vernetzung nötig
(z. B. Dilatanz in der Auflockerungszone)





Schlussfolgerungen aus dem Stoffgesetzvergleich in den beiden BMBF-Verbundprojekten (2004-2010) (4)

- Nach Anpassung an die gemessenen Tagesoberflächenabsenkungen zeigen die 3D-Simulationen der Projektpartner
 - eine gute Übereinstimmung mit untertägigen In-situ-Messergebnissen,
 - geringere Unterschiede bei den berechneten Verformungs- und Spannungsentwicklungen und -verteilungen,
 - größere Unterschiede bei der Schädigungs- und der Dilatanzentwicklung, da
 - die physikalischen Ansätze der Stoffmodelle unterschiedlich sind,
 - die Schädigungsparameter nicht an In-situ-Daten angepasst wurden,
 - die Schädigungsparameter mit den vorhandenen Labordaten mit unterschiedlicher Genauigkeit bestimmt werden konnten,
 - größere Unterschiede treten daher auch bei der Modellierung der Permeabilitätsentwicklung auf.





Ausblick

➤ Beabsichtigtes weiteres Verbundprojekt (BMWi):

„Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz“

- **Gekoppelte thermo-mechanische 3D-Benchmark-Modellberechnungen** zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einem möglichen Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle (Simulation von In-situ-Erhitzerexperimenten und Vergleich mit Messdaten)
- **Modellberechnungen zur Ausdehnung der Auflockerungszone und ihrer Verheilung** (Vergleich der Rechenergebnisse mit In-situ-Messdaten am sogenannten Dammjoch in der Schachanlage Asse)
- **Modellberechnungen zum Einfluss der Wärmeentwicklung in einem HAW-Endlager auf die Auflockerungs- und Ausheilungsprozesse in der EDZ** (Thermo-mechanische Simulation der Verheilung und des Rückgangs der Porosität und Permeabilität in der EDZ)



Heterogene Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag – Untersuchung & Modellierung von MgO-Beton und Asphalt

U. Groh, H. Konietzky, K. Walter,
Institute für Geotechnik, TU Bergakademie Freiberg,
Gustav-Zeuner-Str. 1, 09599 Freiberg

U. Glaubach, W. Kudla
Institut für Bergbau und Spezialtiefbau, TU Bergakademie Freiberg,
Gustav-Zeuner-Str. 1a, 09599 Freiberg

Zusammenfassung

Mittels Diskreter-Elemente-Methode (DEM) wurden heterogene Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag modelliert. Für die beiden ungleichen Komponenten wurde ein Diskretisierungskonzept entwickelt und in den Code PFC^{3D} implementiert, welcher Kugel-Partikel als diskrete Elemente nutzt. Die Zuschlagskörner wurden durch Partikelcluster modelliert. Diese repräsentieren mittels CPA-Untersuchung gewonnene geometrische Eigenschaften der Körner. Zur Proben-Generierung, Simulation von Laborversuchen und Analyse dieser Simulationen wurden Nutzerrouninen entwickelt, desgleichen Methoden zur Kalibrierung von homogenem und heterogenem synthetischen Material. Für MgO-Beton werden Simulationsergebnisse dargestellt, speziell für den Bruchzähigkeitstest. Erste Schritte wurden unternommen bezüglich Sensitivitätsanalyse und Optimierung.

Abstract

The Discrete Element Method (DEM) was used to model heterogeneous structures composed of binder and aggregate. A discretization concept for both unequal components was developed and implemented into the code PFC^{3D} using spherical particles as discrete elements. The aggregate grains were modeled by clusters of particles. These represent geometrical features of the grains obtained by the computerized particle analysis. User routines were developed to generate specimens, to simulate some laboratory tests and to analyse the simulations. Methods were developed to calibrate homogeneous and heterogeneous artificial materials. MgO concrete simulation results are presented especially for the fracture toughness test. First steps were made towards sensitivity analysis and optimization.

1 Einordnung und Ziele

Das dem Beitrag zugrunde liegende Projekt „Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag“ ordnet sich in die Problematik der Baustoffentwicklung für geotechnische Endlager-Verschlussbauwerke ein. Asphalt und MgO-Beton stellen im Rahmen dieser Problematik repräsentative heterogene Werkstoffe dar.

Wichtige Fragen sind in diesem Zusammenhang die Beschreibung und Analyse des Materialverhaltens, insbesondere von Bruch und Schädigung, wozu mittels numerischer Modellierung beigetragen werden sollte. Dabei ging es hier nicht um die homogenisierte Modellierung heterogener Werkstoffe als Kontinuum wie zum Beispiel mittels der FEM, sondern um strukturierte Modellierung aus den beteiligten Komponenten mit unmittelbarer Anwendung der Mechanik auf die Partikel im Mikrobereich. Dadurch soll zum tieferen physikalischen Verständnis für das Materialverhalten und die Rolle der einzelnen Komponenten beigetragen werden mit dem Fernziel einer Materialoptimierung.

Unmittelbare Ziele der Untersuchungen waren

- die Schaffung strukturmechanischer Modelle für Asphalt / Beton aus den beiden Komponenten Bindemittel (Bitumen, MgO) und Zuschlag (Sand, Splitt) mittels Kugeln (PFC^{3D}) bzw. Polyedern (3DEC),
- begleitende Laborversuche zur Kalibrierung und Verifizierung der Modelle als Teil der Modellierungsmethodik,
- Werkzeuge auf Basis der Diskrete-Elemente-Methode zur Vorhersage des Materialverhaltens von Asphalt und MgO-Beton im Mikrobereich (Probenerzeugung, Versuchssimulation, Kalibrierung)
- erste Schritte zur Sensitivitätsanalyse und Optimierung durch Kopplung der Simulationsprogramme mit einer Sensitivitäts- und Optimierungssoftware mit dem Fernziel Baustoffoptimierung.

2 Modellierungsmethodik

Im Rahmen des Strukturmodells werden die einzelnen Komponenten des heterogenen Materials (Bindemittel, Zuschlag) jeweils als Mengen separater Elemente abgebildet. Sie sind die Träger der geometrischen und physikalischen Eigenschaften der Komponenten und besitzen ggf. auch Stoffgesetze (die deformierbaren Polyeder in 3DEC). Die Abbildung der räumlichen Struktur des heterogenen Materials erfolgt durch Festlegung von Größe und Verteilung der Elemente einschließlich der Mikro-Hohlraumstruktur. Soweit das Brechen von Zuschlagskörnern interessiert, werden Elementcluster zur Darstellung von Körnern verwendet, um die internen Kraftwirkungen zu modellieren.

Die Abbildung der Wechselwirkungen der Komponenten wird an den Berührungspunkten der Elemente durch Kontaktgesetze vorgenommen (Kraft-Verschiebungs-Gesetze, ggf. mit Bonds zur Modellierung von Bindung und Bruch sowie Gleiten).

Die Realisierung des Strukturmodells erfolgt im Rahmen der Diskrete-Elemente-Methode (Codes PFC^{3D} bzw. 3DEC), die zeitlich alternierend Kontaktkräfte und Bewegung fortschreibt und eine Veränderung der Struktur ermöglicht.

Für die numerische Modellierung wurden folgende Schwerpunkte gesetzt:

- Erzeugung der geometrischen Mikrostruktur als C++-Präprozessor zum Simulationsprogramm (Kugelpackungen für PFC^{3D}, Polyederpackungen für 3DEC, Erzeugung von Zuschlagsclustern)
- Entwicklung von Kontakt-/Stoffgesetzen:
 - Modellieren der Kontakt-Physik
 - Nutzerdefinierte Verwaltung der Kontakteigenschaften (Sprache FISH)
 - Nutzerdefinierte Stoffgesetze für Asphalt (C++) und MgO-Beton (FISH)
 - Kalibrierung der Kontaktgesetze
- Tests an kleinen Modellen auf Basis von experimentellen Ergebnissen (Druck-, Zug-, Scher-, Bruchzähigkeitsversuche)
- Analyse- und Bewertungstool auf Basis der DEM für zusätzliche geometrische oder physikalische Eigenschaften

Bei der Auswahl des 3D-Simulationsprogramms wurden folgende Eigenschaften und erste Erfahrungen berücksichtigt: Die Software 3DEC arbeitet mit (auch deformierbaren) Polyedern auf der Basis von Voronoi-Körpern, die mehr physikalische Möglichkeiten und eine bessere Strukturabbildung ermöglichen. 3DEC ist jedoch rechenintensiver und numerisch weniger stabil. Die Software PFC^{3D} arbeitet mit starren Kugeln, standardmäßig auch mit Kugel-Verbunden (Clumps), die jedoch keine innere Physik ermöglichen. PFC^{3D} ist schneller, robuster, aber auch geometrisch einfacher und physikalisch eingeschränkter, vgl. Abbildung 1.

Schnelligkeit und Robustheit gaben den Ausschlag, PFC^{3D} für die weiteren Untersuchungen zu verwenden.

Das numerische Materialmodell in PFC^{3D} lässt sich wie folgt zusammenfassen:

- Es handelt sich um eine 3D-Realisierung als **Diskrete-Elemente-Methode**, wobei die Elemente starre Kugeln (Partikel) sind. Es findet eine dynamische Kontaktdetektierung statt. Die Approximation erfolgt als explizites Differenzenverfahren 2. Ordnung in Raum und Zeit.
- Die Partikelanzahl ist begrenzt (Speicher, Rechenzeit), deshalb wird eine **Teilhomo-genisierung** vorgenommen. Unterhalb der Homogenisierungsgrenze sind Körner nicht mehr diskret abbildbar.
- Die Partikel sind alle gleich groß ($d = 0,6 \text{ mm} = \text{Homogenisierungsgrenze}$)

- Die numerische **Komponente ZG** (weiterhin als Zuschlag bezeichnet) besteht aus den Zuschlagskörnern mit einem Durchmesser $\geq d$ und wird in Form einzelner Partikel oder Partikelcluster aus mehreren Partikeln realisiert.
- Die numerische **Komponente BMF** stellt ein Gemisch aus Bindemittel und Zuschlagskörnern mit einem Durchmesser $< d$ dar („Bindemittel mit Feinanteil“) und wird in Form einzelner homogener Partikel realisiert.
- Es gibt **4 Kontakttypen**: korninterner Kontakt (ZG = ZG), Kornberührung (ZG - ZG), Kontakt Korn mit Bindemittel (ZG - BMF), Kontakt im Bindemittel (BMF = BMF).
- Als Kontaktmodell im MgO-Beton wird das linear elastische Modell mit Kontaktbonds verwendet (Parameter: k_n , k_s , f_{ric} , n_{bond} , s_{bond}) mit unterschiedlichen Parameterwerten für die verschiedenen Kontakttypen.

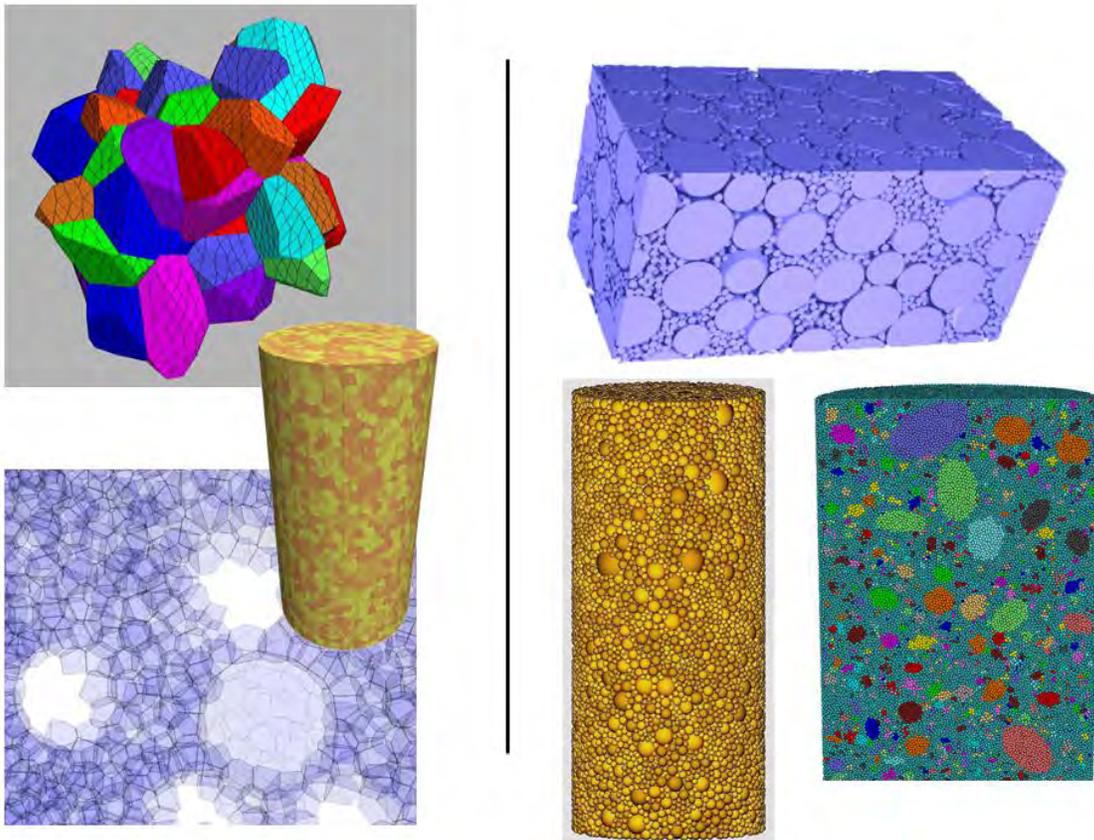


Abb. 1: Elemente-Darstellung von Proben in 3DEC und PFC^{3D}

3 Laboruntersuchungen

Zu Beginn der Arbeiten wurde ein Programm von Materialuntersuchungen konzipiert, das als Datenbasis für die strukturelle und physikalische Modellierung dienen sollte. Dabei ging es einerseits um geometrische Eigenschaften, die sich vorwiegend auf den Zu-

schlag bezogen, zum Beispiel Größenverteilungen (Siebkurven), Abmessungen, Formfaktoren (CPA-Untersuchung), Porosität usw. Andererseits wurden mechanische Eigenschaften ermittelt wie Rohdichte, Reindichte, Druckfestigkeit (uniaxial, triaxial), Spaltzugfestigkeit, E-Modul, Querdehnungszahl, Bruchzähigkeit usw. bei Beton bzw. diverse Kriechversuche bei Asphalt, vgl. die Tabellen 1 und 2.

Als Modellmaterialien für die Versuche wurden festgelegt:

- **Beton:** nach 28 Tagen Aushärtung
 - Bindemittel: 18,3 M% MgO G75 der Fa. Styromag mit 18,3 M% R-Lösung als Anmachflüssigkeit (gegenüber dem anstehenden Salzgestein kein Lösungspotential)
 - Zuschlag: 63,4 M% aus Sand/Kies der Körnung 0/8 der Fa. Quickmix
- **Asphalt:**
 - Bindemittel: Oxidationsbitumen, Sorte STELOX 85/25
 - Zuschlag: 85 % Natursand 0/2, 15 % Tonschiefermehl 0/90 µm
 - Bindemittelanteil so, dass Porenraum (33 Vol%) ausgefüllt (Haufwerk gesättigt mit Bindemittel, fast porenfrei)

Untersuchung	Zuschlag	MgO-BM	MgO-BMF	MgO-Beton
CPA-Korngrößenanalyse	X			
CPA-Kornformanalyse	X			
Petrografische Analyse	X			
Bruchkraft Einzelkorn	100 Stück			
Bruchkraft Kornverbund	1			
Reindichte, ggf. Rohdichte	X	6	6	6
Porosität (offene, Gesamt-)	-	6	6	6
E-Modul, Poissonzahl stat.	-	6	12 (+5)	6
E-Modul, Poissonzahl dyn.	-	6	12 (+5)	6
Uniaxiale Druckversuche	-	6	12	6
Spaltzugversuche	-	6	12	6
Triaxiale Druckversuche	-	-	5	8
Haftscherversuche	-	-	2	2
Uniaxiale Kriechversuche	-	-	3	3
Bruchzähigkeitsversuche	-	-	5	5

Tab. 1: Übersicht über Anzahl und Art der Laborversuche MgO-Beton

Untersuchung	Zuschlag	Bitumen-BM	Bitumen-BMF	Asphalt
CPA-Korngrößenanalyse	X	-	-	-
CPA-Kornformanalyse	X	-	-	-
Korndichte Tonschiefermehl B 0.09	2	-	-	-
Korndichte Natursand 0/2	2	-	-	-
Grenzlagerungsdichten nach DIN 18126	6	-	-	-
Reindichte, ggf. Rohdichte	-	8	6	8
Spannungsabhängiger Scherversuch	-	14	14	-
Temperaturabhängiger Scherversuch	-	10	10	-
Spannungsabhängiger uniaxialer Zugkriechversuch mit Retardation (Langzeit)	-	6	6	-
Uniaxialer Druckkriechversuch (Langzeit)	-	-	3	6
Uniaxialer Druckkriechversuch mit Spannungsrelaxation (Langzeit)	-	-	-	1
Uniaxialer Druckversuch mit verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten	-	-	15	15
Laufzeitmessung Ultraschall	-	6	6	12

Tab. 2: Übersicht über Anzahl und Art der Laborversuche Asphalt

Alle Versuche wurden jeweils für Bindemittel mit Feinanteil (BMF) und das vollständige Gemisch (MgO-Beton bzw. Asphalt) durchgeführt (einzelne zusätzlich auch für reines Bindemittel BM), während für die Zuschlagskörner (petrographische Analyse bei Beton: 63% Quarzkörner) nur wenige mechanische Eigenschaften ermittelt werden konnten. Bei Verwendung von Zuschlags-Materialwerten aus der Literatur (mittlere Werte von Quarz, Quarzglas, Quarzit) waren die Laborwerte für Beton in der Simulation nicht reproduzierbar. Es musste deshalb ein spezielles Kalibrierungsverfahren entwickelt werden, welches die Zuschlagseigenschaften gewissermaßen als Differenz zwischen Beton und BMF ermittelt.

4 Probengenerierung

Die geometrische Generierung von Versuchsproben wurde außerhalb von PFC3D mit dem C++-Programm SpherePackFB durchgeführt, welches quaderförmige Proben erzeugt, bei denen sich die Kugeln nur berühren, und daraus zylindrische Proben ausschneidet. Das Resultat sind Proben mit rauer Oberfläche, die jedoch spannungsfrei sind und nur virtuelle Kontakte besitzen, so dass Bonds nicht problemlos installierbar sind.

Diese Proben werden in PFC3D mit einem „Glätten“ genannten Algorithmus bearbeitet, der eine glattere Oberfläche erzeugt (weniger Spannungsspitzen bei Druckbelastung), wobei reale (bondbare) Kontakte entstehen und die internen Spannungen in Bezug auf die durchzuführenden Versuche niedrig bleiben (unter 1% der Maximalspannung). Die Anzahl der aktiven Kontakte zu Nachbarpartikeln (Koordinationszahl) wird im Mittel auf über 5.8 gebracht, die Anzahl der Floater (Koordinationszahl<4) auf unter 3%. Das „Glätten“ stellt einen Ausgleichsprozess des Partikel-Granulates in einer geeignet bemessenen „Büchse“ dar.

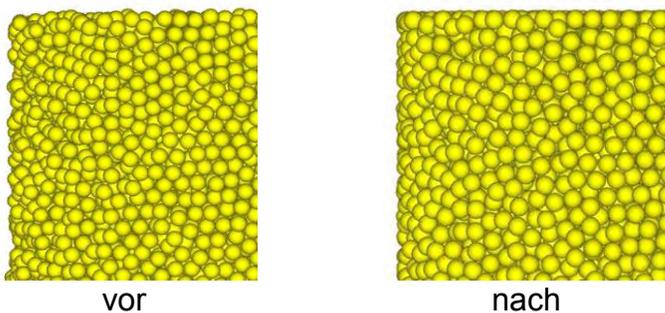


Abb. 2: Ausschnitt der Probe vor und nach dem Glätten

Der numerischer Aufwand auf der verfügbaren Rechentechnik (Plattform mit zwei QuadCore-Intel Xeon X5365, 64 bit, 3.00 GHz, 32 GB RAM) lässt sich an folgendem Beispiel illustrieren, welches die größten gerechneten Proben (BMF) verkörpert:

- Modellierung einer Probengruppe vom Typ Zylinder (D, H) mit D=50 mm
- H/D=1 für Spaltzugversuche => Probe P0600 (600.000 Partikel)
- H/D=2 für Druckversuche => Probe P1200 (1.200.000 Partikel)
- H/D=4 für Bruchzähigkeitstests => Probe P2400 (2.400.000 Partikel)
- Probenerzeugung: 3.5 / 7.2 / 12.5 Tage für P0600/ P1200/ P2400
- Hauptspeicherbedarf: 2.4 / 4.7 / 9.5 GByte analog
- Versuchssimulation: 3.5 / 11.5 / 16.2 Tage analog

5 Erzeugung der Zuschlagskorn-Cluster

Die geometrische Modellierung jedes Zuschlagskorns (ZG) erfolgte durch Erzeugung der Hüllfläche eines zufälliges Ellipsoid mit zufälliger Orientierung am zufälligen Ort innerhalb der Probe, wobei der Cluster durch die Gesamtheit der Partikel gebildet wird, deren Mittelpunkt im Inneren der Hüllfläche liegt. Die zufälligen Abmessungen der Halbachsen a, b, c werden aus den Verteilungen der CPA-Untersuchung (Computerized Particle Analyzer) ermittelt, wobei die Verteilungen von maximaler Breite und des Verhältnisses von maximaler Breite zu maximaler Länge zur Verfügung stehen, so dass zufällig b, a/b, c/b gewählt werden.

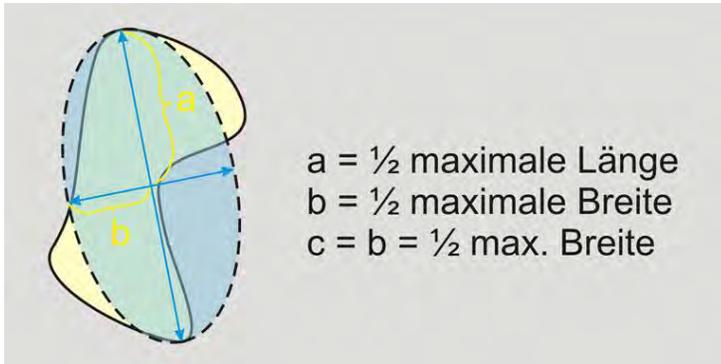
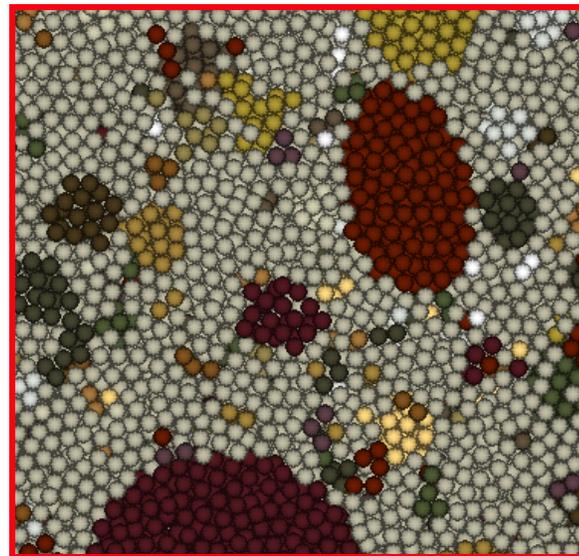
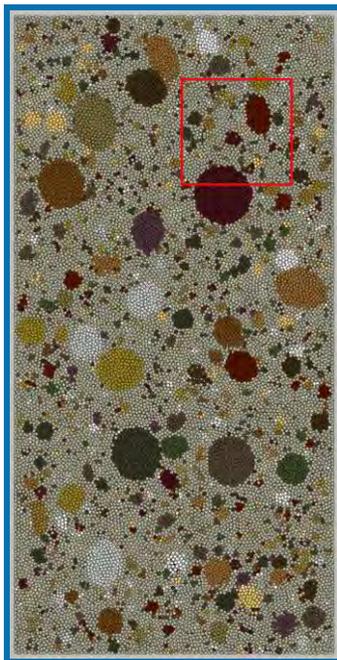


Abb. 3: Geometrische Daten bei der Cluster-Erzeugung (hier: Rotationsellipsoid)



Ausschnitt

Abb. 4: Beispiel für die Erzeugung von Clustern in einer Probe (Schnitt)

Ein anfangs unterschätztes Problem stellte die Notwendigkeit dar, dass alle Partikel eines Clusters zusammenhängend gebondet sein müssen, so dass ein auch physikalisch zusammenhängendes Korn entsteht. Eine Kompromisslösung wurde gefunden.

Für die Cluster wurde in FISH eine eigene Datenstruktur implementiert in Analogie zu den PFC-internen Datenstrukturen mittels verbundener Listen sowie eine Reihe von Analyse-Werkzeugen geschaffen wie

- *get_info_contact_types:*
Ermittelt alle / aktive / gebundene / unter Zug stehende / geschwächte Kontakte, alles nach 4 Kontakttypen differenziert sowie die Summe.
- *get_info_all_clusters:*
Ermittelt die Anzahlen aller sowie zerteilter Cluster, Anzahl zusätzlicher Teile, darin enthaltener Partikel, Anzahlen von Clustern mit 1,2,...,9 und mehr Partikeln.
- *classify_contact_normal_force:*
Klassifiziert die Kontakt-Normalkraft nach Größenklassen, nach Druck, Zug, Summe.
- *del_small_clu_parts:*
Sucht den größten Cluster-Teil heraus, findet die anderen Teile und löst sie aus der Datenstruktur, so dass der Cluster nur noch aus einem einzigen zusammenhängend gebundenen Teil besteht.

Die nachfolgende Abbildung 5 illustriert die Erzeugung der Materialeigenschaften der Cluster. Zum Bonden der Cluster werden die BMF-Partikel vorübergehend geschrumpft und die ZG-Partikel leicht expandiert, um dann innerhalb der Cluster, aber nur dort, auch Bonds unter geringer Zugbelastung zu installieren und damit zusätzliche interne Bindungen herzustellen. Die wenigen immer noch ungebundenen ZG-Partikel werden zu BMF umgewandelt.

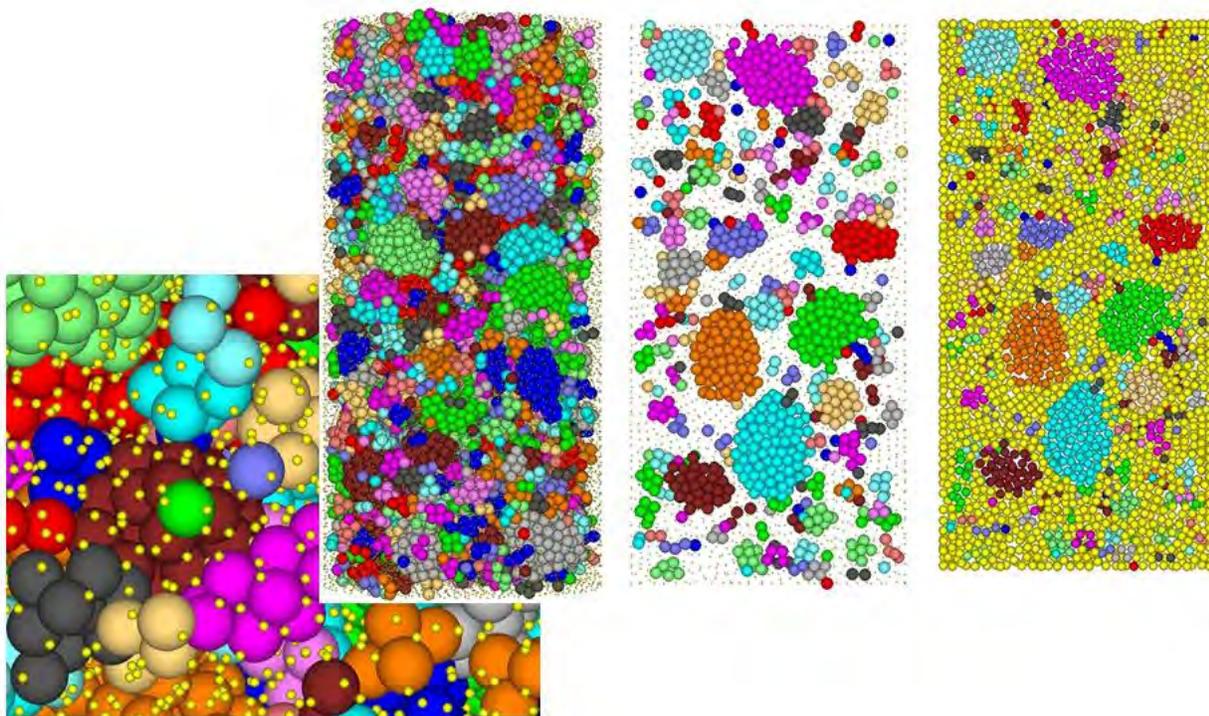


Abb. 5: Physikalische Cluster-Erzeugung

Ein Beispiel für die Ausgabeinformation der Routine `get_info_contact_types` wird in der Abbildung 6 angegeben, berechnet für eine Probe P0040 aus 36917 Partikel und für den Zustand unmittelbar vor einem Versuch. Die Kontaktarten haben folgende Anteile:

BMF=BMF: 48%, ZG-BMF: 26%, ZG=ZG: 20%, ZG-ZG: 3%, Wandkontakte: 3%.

```
Pfc3D>get_info_contact_types
-----
tensBOND: cnf < 0.0,   cnf = ContactNormalForce,   n_bo = n_bond
-----
contact_type | ALL cont.| ACTIVE c.| contBOND | tensBOND | -cnf>10%n_bo
0  ball-wall   5268     3201       0         0         0
1  ZG=ZG      43752    21134      21134     6297     452
2  ZG-ZG       8963     2984       2062     507      47
3  ZG-BMF     71473    28198      27606     6589     97
4  BMF=BMF   119148   51130      50899    11501     0
Summe =      248604  106647    101701    24894    596
-----
contact_type          % ACTIVE contacts
0  ball-wall          3.00149089988e+000
1  ZG=ZG              1.98167787186e+001
2  ZG-ZG              2.79801588418e+000
3  ZG-BMF             2.64404999672e+001
4  BMF=BMF           4.79432145302e+001
-----
```

Abb. 6: Klassifikation der Kontakttypen mittels Routine `get_info_contact_types`

6 Numerisches Versuchsprogramm, Kalibrierung des Modells

Das auf PFC^{3D} aufgesetzte Simulationsprogramm wurde als Programmsystem in FISH angelegt, welches für die Simulation unterschiedlicher Versuche mit unterschiedlichen heterogenen Materialien und deren homogenen Komponenten genutzt werden kann. Implementiert bzw. vorbereitet sind zurzeit folgende Versuche:

- Druckversuch (uniaxial, triaxial, Zylinder),
- Direkter Zugversuch (Zylinder, Quader),
- Spaltzugversuch,

- Bruchzähigkeitstest (Zylinder),
- Druck-Kriechversuch (Zylinder),
- Zug-Kriechversuch (Zylinder, Quader) – vorbereitet,
- Scher-Kriechversuch (Zylinder) – vorbereitet.

Das Simulationsprogramm kann als Werkzeug für Stoffgesetz-Experimente und zum Kalibrieren der Materialparameter verwendet werden. Unter Verwendung der eingebauten Routinen ist eine Modifikation zur Analyse anderer Aufgaben möglich, zum Beispiel wurde der Spaltzugversuch zur Simulation der Einzelkorn-Druckversuche modifiziert.

Eine zentrale Aufgabe stellt das Kalibrieren des numerischen Modells dar. Dabei sind die PFC-Mikro-Modellparameter so einzustellen, dass die bei Laborversuchen gewonnene Makro-Materialparameter bei den Versuchssimulationen reproduziert werden, und zwar durchgängig mit dem gleichem Parametersatz. Als modellinterne Mikro-Parameter dienen z. B. beim linearen Modell mit Kontaktbonds die Partikel-Steifigkeiten k_n , k_s , die Kontakt-Bondfestigkeiten n_bond , s_bond sowie die Partikel-Reibungszahl $fric$. Als Makro-Materialparameter wurden z.B. E-Modul E , Poisson-Zahl ν und Druckfestigkeit σ_D festgelegt. Die Kalibrierung wurde hier anhand von Druckversuchen (uniaxial, triaxial) vorgenommen. Aus systematischen Gründen wurden die lokalen Mikro-Parameter durch globale Modellparameter E_c , V_c , F_c wie folgt ersetzt (mit r = Partikelradius):

$$k_n = 4r \cdot E_c, \quad k_s = k_n / V_c, \quad n_bond = s_bond = 4r^2 \cdot F_c.$$

Für die Kalibrierung von heterogenem Zwei-Komponenten-Material wurde eine Strategie entwickelt, die in Abbildung 7 dargestellt ist.

Diese Strategie trägt der Situation Rechnung, dass zwar für das Bindemittel BMF und den Beton BET, jedoch nicht für den Zuschlag ZG Materialdaten (E , ν , σ_D) zur Verfügung stehen. Die Strategie stützt sich auf folgende drei Komponenten:

- einen Algorithmus zur Kalibrierung der homogenen Komponenten mittels uniaxialer Druckversuche,
- ein Näherungsmodell für elastische Zwei-Komponenten-Gemische unter uniaxialer Belastung zur Herstellung des Zusammenhanges zwischen den elastischen Parametern von Komponenten und Gemisch,
- eine Technik zur Kalibrierung der Festigkeit der Cluster mittels Einzelkorn-Druckversuchen.

Der Algorithmus zur **Kalibrierung der homogenen Komponenten** mittels uniaxialer Druckversuche basiert auf einer schrittweisen Anpassung der Transformationsparameter α , β , γ , δ in dem auch durch spätere Sensitivitätsanalysen bestätigten Näherungszusammenhang zwischen den globalen Modellparametern E_c , V_c , F_c und den globalen Materialparametern E , ν , σ_D

$$E_c = (\gamma + \delta \cdot v) \cdot E, \quad V_c = \alpha + \beta \cdot v, \quad F_c = f \cdot \sigma_D.$$

In drei bis vier Kalibrierungsschritten werden E_c , V_c , F_c ausreichend genau bestimmt.

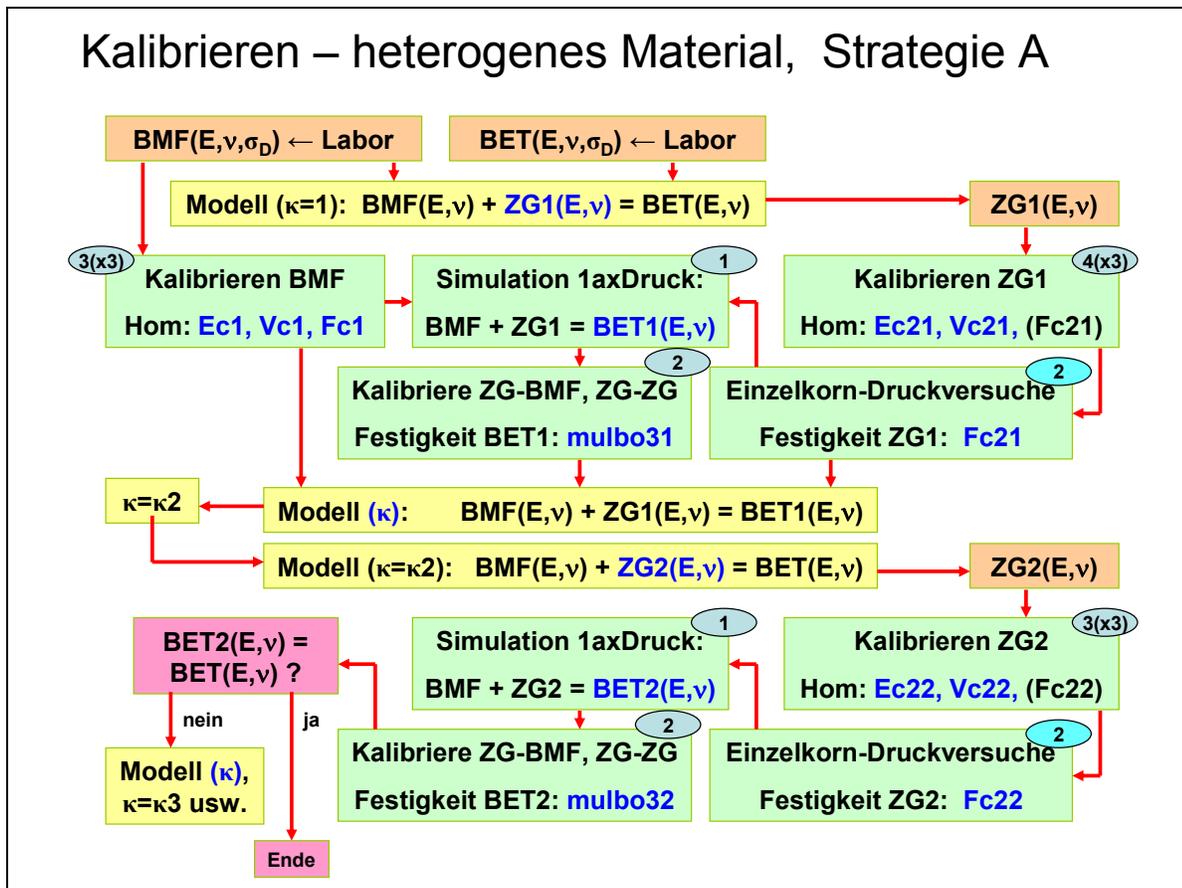


Abb. 7: Strategie zur Kalibrierung eines Zwei-Komponenten-Gemisches

Das **elastische Zwei-Komponenten-Gemischmodell** dient der näherungsweise Berechnung der elastischen Parameter des Zuschlags (Komponente B) aus denen von BMF (Komponente A) und denen des Gemisches. Das Modell wird als zweidimensionales Analogon in Abbildung 8 veranschaulicht und enthält folgende Voraussetzungen:

- Das Gemisch besteht aus zwei elastischen Komponenten: $A(E_A, v_A)$, $B(E_B, v_B)$.
- Es tritt nur uniaxiale Belastung auf.
- Das Gemisch besteht aus der Reihenschaltung der Materialien 1 und 2 in Belastungsrichtung, wobei Material 1 mit Material A identisch ist und Material 2 eine Parallelschaltung der Materialien A und B quer zur Belastungsrichtung darstellt.

- Zwischen den Materialien A,B besteht ein vorgegebenes festes Volumenverhältnis $V_B / V = \text{const.}$
- Ein Parameter κ modifiziert das Anteilsverhältnis der Komponenten A,B in Längs- und Querrichtung bei festem Volumenverhältnis.

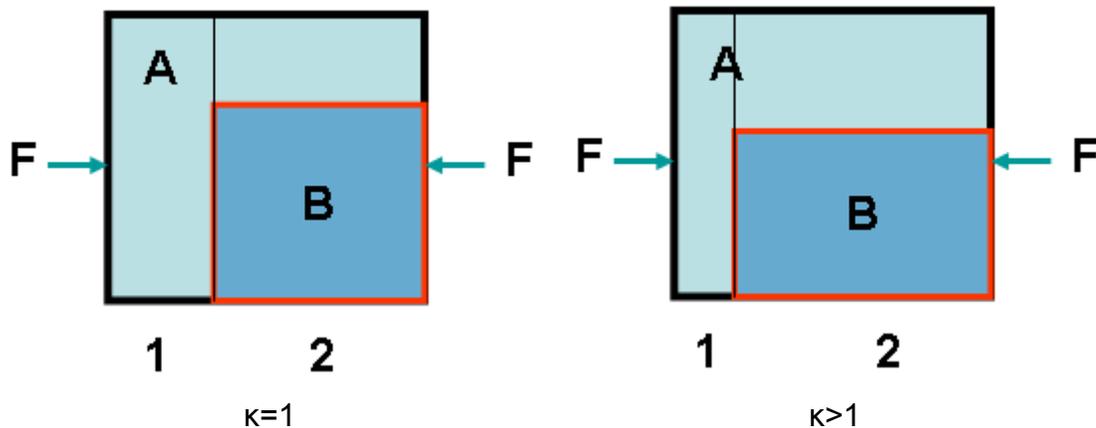


Abb. 8: Zweidimensionales Analogon zur Geometrie des Gemischmodells

Das Gemischmodell liefert zwei Zusammenhänge für die Gemischparameter E , ν :

$$\frac{1}{E} = \frac{1-q_l}{E_A} + \frac{q_l}{(1-q_Q) \cdot E_A + q_Q \cdot E_B}, \quad \frac{\nu}{E} = \frac{\nu_A}{E_A} \cdot (1-q_l) + \frac{(1-q_Q) \cdot \nu_A + q_Q \cdot \nu_B}{(1-q_Q) \cdot E_A + q_Q \cdot E_B} \cdot q_l.$$

Dabei ist $q_l = \kappa \cdot q$ und $q_Q = \kappa^{-1} \cdot q^2$, wobei $q^3 = V_B / V$.

Diese Zusammenhänge werden einerseits genutzt, um die elastischen Parameter des Zuschlags näherungsweise zu berechnen

$$(E, \nu), (E_A, \nu_A), \kappa \quad \rightarrow \quad (E_B, \nu_B),$$

wobei zu Beginn eine „isotrope“ Verteilung des Zuschlags angenommen wird ($\kappa=1$). Die Werte E , ν des simulierten Betons BET1 mit kalibrierten Komponenten (Näherung ZG1) werden dann für eine Bestimmung des Parameters κ für die Probe benutzt:

$$(E, \nu), (E_A, \nu_A), (E_B, \nu_B) \quad \rightarrow \quad \kappa.$$

Der Prozess kann ggf. iterativ fortgesetzt werden.

Zur **Kalibrierung der Zuschlagsfestigkeit** wurden die Resultate der Einzelkorn-Druckversuche des realen Zuschlags und ihrer Simulationen herangezogen. Der Weg besteht in der Anpassung der Bondfestigkeit des bereits kalibrierten Zuschlags ZG durch Anpassung des mittleren Verhaltens im Einzelkorn-Druckversuch.

Aus 100 Druckversuchen mit Körnern 4-8 mm wurde eine Auswahl von 24 Körnern vom Typ Mineralbruchstücke/Quarz festgelegt. Von jedem Versuch waren als Informationen Kornvolumen, -höhe und Bruchkraft verfügbar (V , h , F_{max}). Jeder Versuch wurde mit dieser Information in je 10 Korn-Instanzen simuliert, d. h. mit zwei dazu passenden zufälligen Halbmessern, so dass insgesamt 240 Simulationen durchzuführen waren.

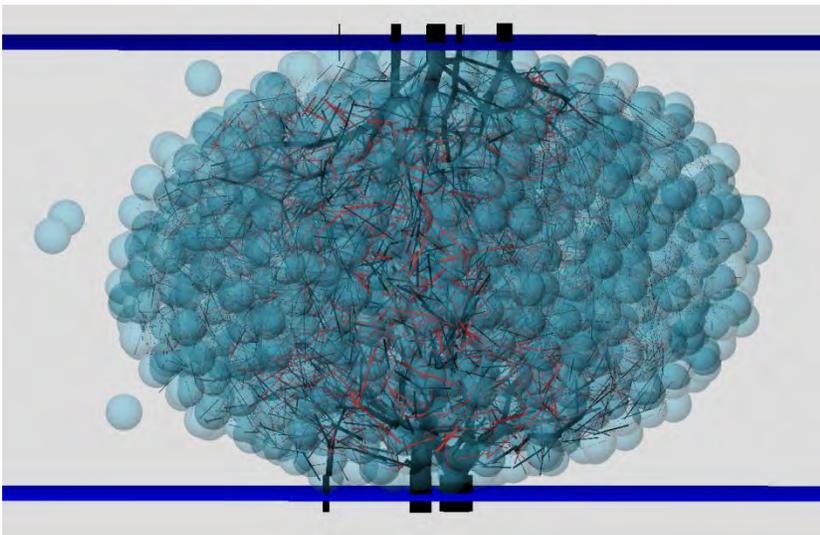
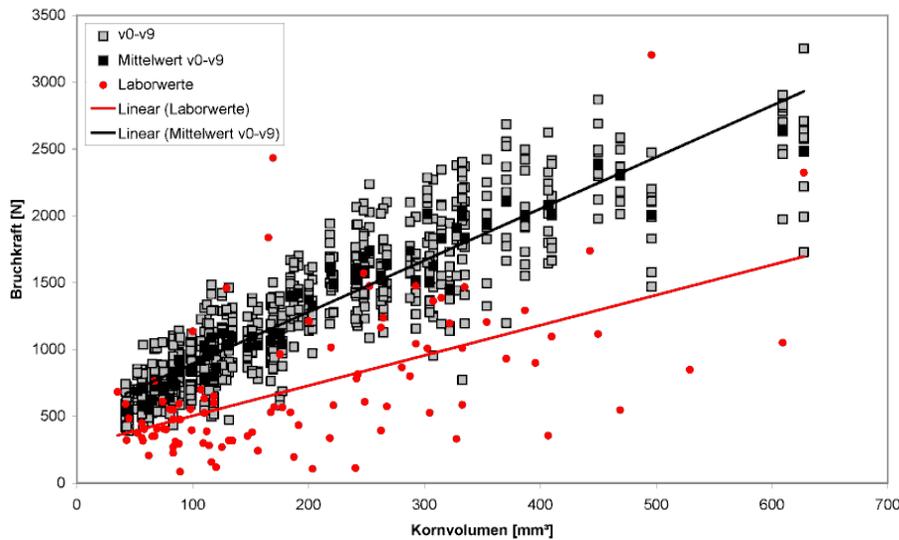
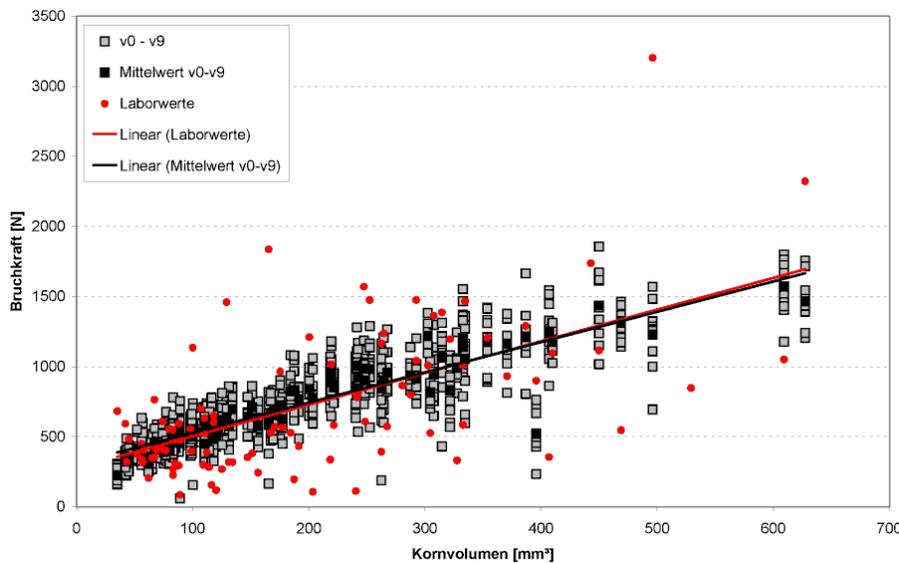


Abb. 9: Beispiel der Simulation eines Einzelkorn-Druckversuches

Der Vergleich zwischen Realität und Simulation wurde in der Ansicht Bruchkraft vs. Kornvolumen durchgeführt. Ziel war es, die Regressionsgerade der Laborversuche mit der Regressionsgeraden der Simulationen in Übereinstimmung zu bringen. Die Abbildungen 7 vergleichen die Situation vor und nach dem Ändern der Bondfestigkeit um den Faktor $1/1.56$ (mittels Ausmessen der Grafik, in 2 Versuchsschritten).



Anfangssituation



Situation nach 2 Anpassungsschritten

Abb. 10 Labor- und Simulationsergebnisse der Einzelkorn-Druckversuche

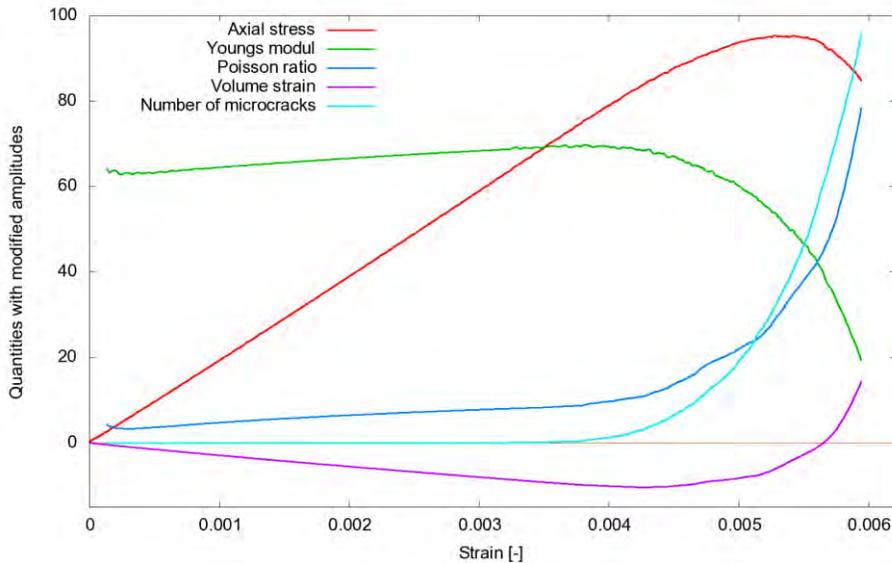
7 Simulationsergebnisse für MgO-Beton (Beispiele)

Nachfolgend werden ausgewählte Ergebnisse der Simulationen von MgO-Beton dargestellt, die ein Bild der bisher implementierten Möglichkeiten zeichnen. Zumeist wurden diese Simulationen aus Zeitgründen an kleinen Proben vorgenommen (20000 bis 80000 Partikel), mehr Partikel zeigen jedoch eine wesentlich bessere Auflösung der physikalischen Erscheinungen, vgl. Abbildung 11.

Druckversuche: Spannungen und Dehnungen wurden aus globalen Daten (auf Platten, Mantel) ermittelt, der E-Modul ist der aktuelle Sekantenanstieg der Arbeitskurve, die

Poissonzahl wird aus weiteren Daten nach Formel $\nu = 0.5 [1 - E \cdot \epsilon_V / (\sigma_z + 2 \cdot \sigma_r)]$ berechnet. Als Mikroriss wird ein Bondbruch (Scher- oder Zugbruch) bezeichnet.

Amplitudenmodifizierte Ergebniskurven:
 Axialspannung, E-Modul, Poissonzahl, Volumendehnung,
 Mikrorissanzahl gegen (negative) Axialdehnung



Mikrorisse (zeitlich),
 1.2 Millionen Partikel

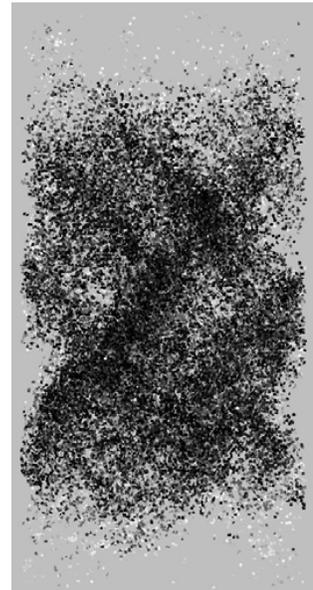
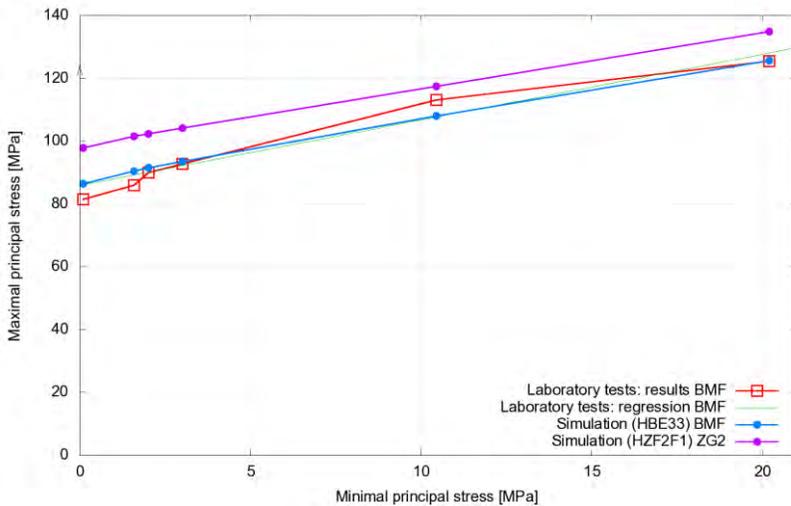


Abb. 11: Ergebnisse bei der Simulation des uniaxialen Druckversuches



Komponenten:

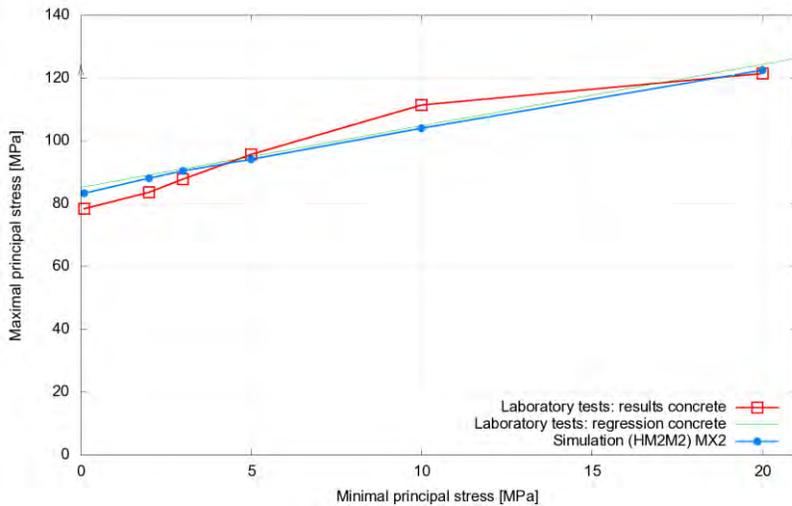
Bindemittel mit Feinanteil
 BMF:

- Laborversuche
- Simulation

Fiktiver Zuschlag ZG2:

- Simulation

Abb. 12: Hüllkurven der Triaxialversuche (max. gegen min. Hauptnormalspannung)



Gemisch:

Beton:

- Laborversuche
- Simulation

Abb. 13: Hüllkurven der Triaxialversuche mit MgO-Beton

Bruchzähigkeitstest (K_{IC} -Bestimmung): Die Versuchsanordnung ist in Abbildung 14 zu sehen. Für den Beton wurden zwei unterschiedliche Proben untersucht. Bei einer der beiden liegt ein großes Korn unmittelbar am eingesägten Kerb (Kornverteilung cluster 1), was wie erwartet zu einem andern Bruchverhalten als bei der Kornverteilung cluster 2 führt.

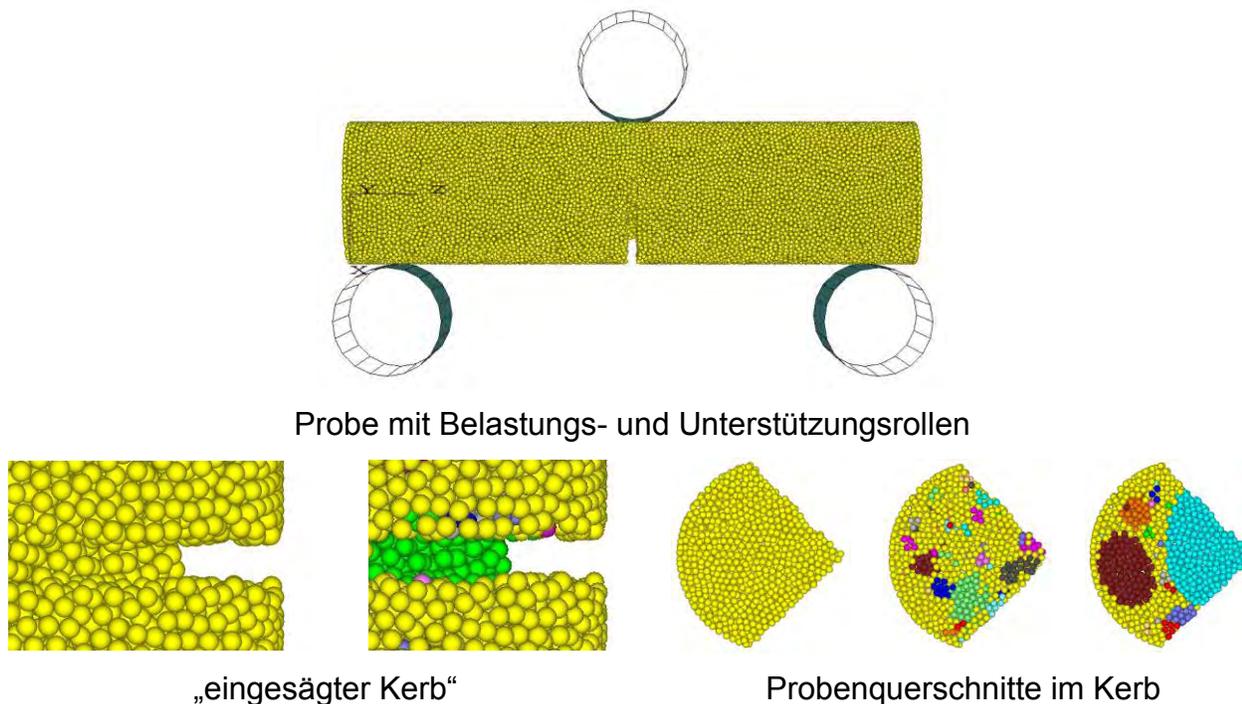
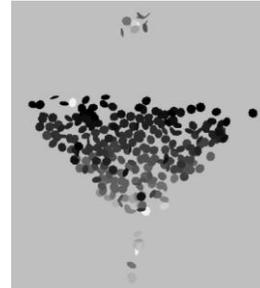
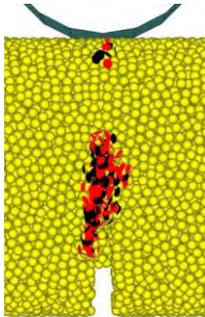
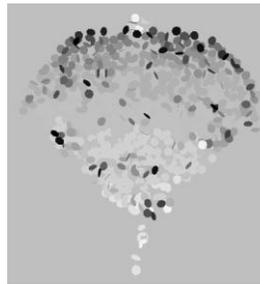
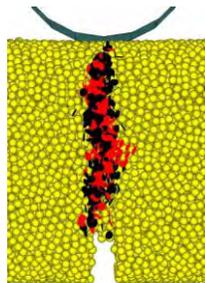


Abb. 14: Versuchsanordnung des Bruchzähigkeitstests

Kurze Zeit nach dem Maximalwert der Rollenkraft



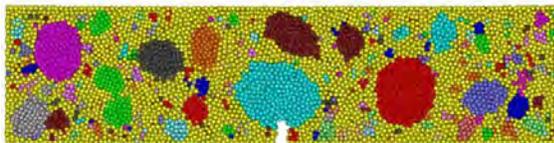
Nach Durchriss



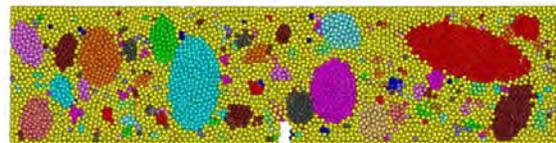
Darstellung längs zur Achse
rot/schwarz=Zug-/Scherbruch

Darstellung quer zur Achse
hell/dunkel=früher/später

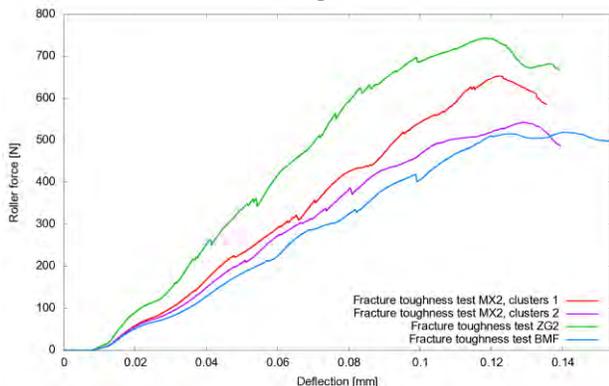
Abb. 15: Mikrorisse beim Bruchzähigkeitstest



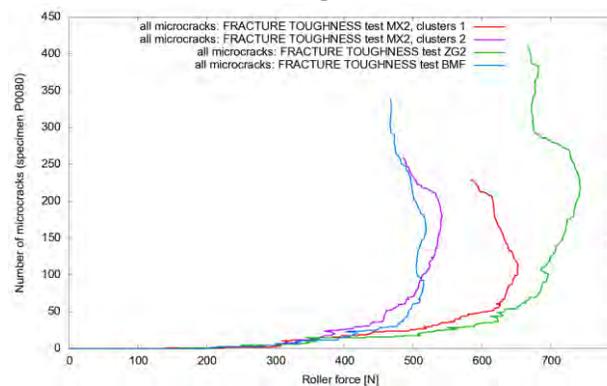
Kornverteilung: clusters 1



Kornverteilung: clusters 2



Rollenkraft vs. Durchbiegung



Mikrorissanzahl vs. Rollenkraft

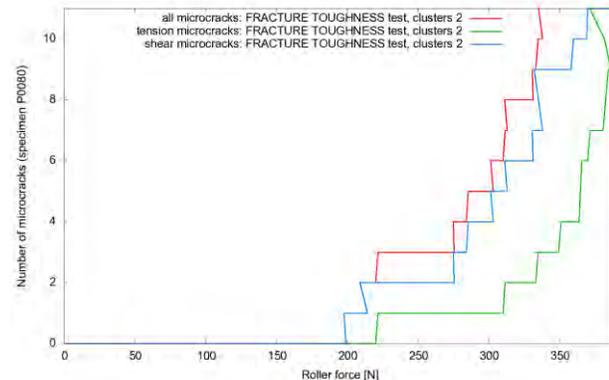
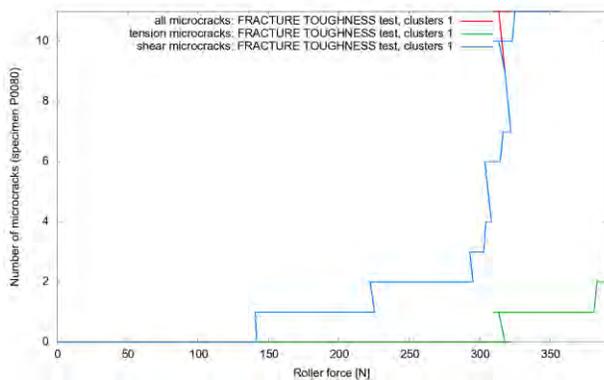
Abb. 16: Resultate von Bruchzähigkeitstests (Zuschlag, BMF, Beton mit clusters 1 und 2)

In der Abbildung 15 ist das Fortschreiten der Mikrorisse beim Brechen der Probe sichtbar. In Abbildung 16 wird die Entwicklung von Rollenkraft und Mikrorissanzahl beim Versuch mit Gemisch und Komponenten dargestellt.

Beton: clusters 1

Beton: clusters 2

Rissinitialisierung:



Gesamtbild:

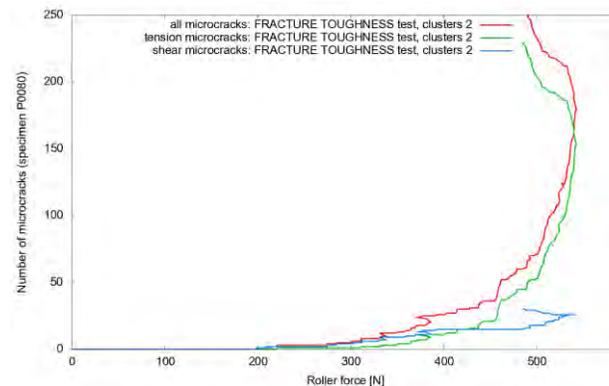
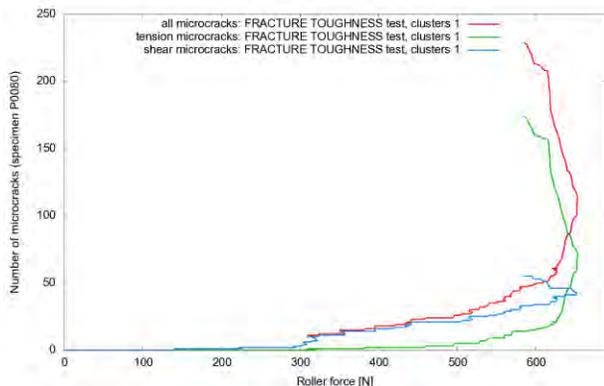


Abb. 17: Mikrorissanzahl (Zug-, Scher-Risse, Summe) beim Beton-Bruchzähigkeitstest

Für Beton wird die Entwicklung des Anteils Mikrorisse [%] an allen Mikrorissen getrennt nach Risstypen in den Abbildungen 18 und 19 gezeigt (komponenteninterne: ZG=ZG, BMF=BMF und komponentenexterne: ZG -ZG, ZG – BMF)

In diesen Darstellungen findet keine Berücksichtigung, dass schon die den Risstypen zugrunde liegenden Typen gebondeter aktiver Kontakte im Anfangszustand des Materials mit unterschiedlichen Anteilen vertreten sind. Deshalb wird noch zu einer Größe relativ zum Anfangszustand übergegangen. Das ist die Entwicklung des Risstypanteils an allen Mikrorissen [%], bezogen auf den entsprechenden anfänglichen Bondanteil [%], also die Entwicklung der Anteilsproportionalität der Mikrorisse. Ein Wert von 1 bedeutet anteilsproportionale Rissentwicklung bei den entsprechenden Bonds, Werte über oder unter 1 bedeuten Über- bzw. Unterproportionalität.

Für den Bruchzähigkeitstest mit Beton (clusters 1) ergaben sich die folgenden Resultate.

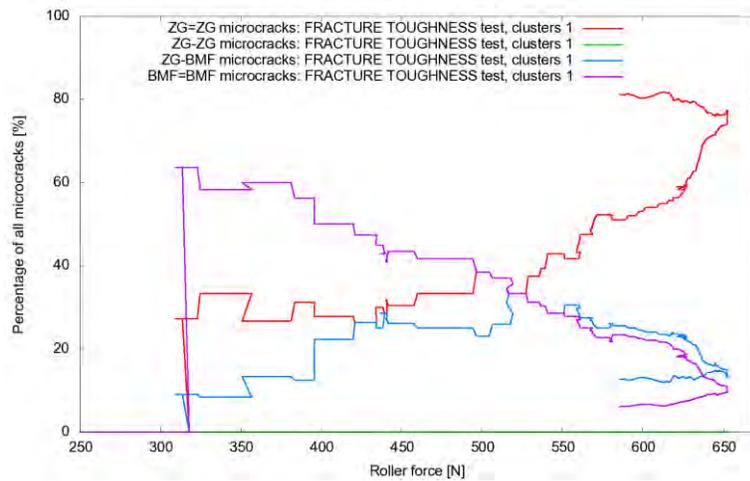


Abb. 18: Entwicklung des Risstypanteils an allen Mikrorissen [%] vs. Rollenkraft

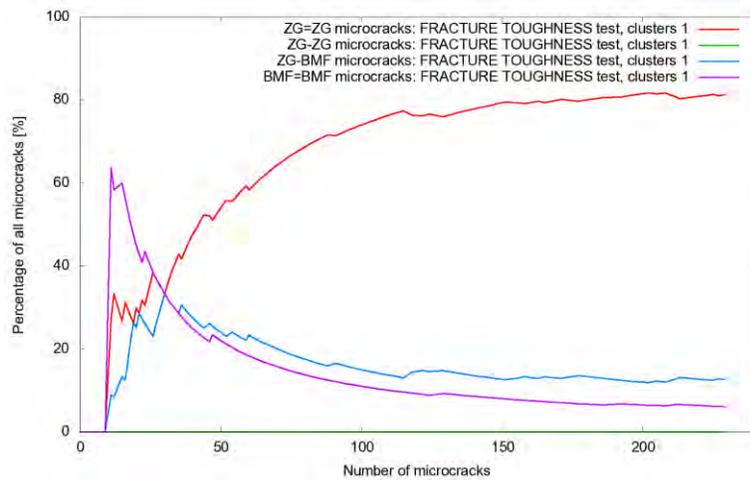


Abb. 19: Entwicklung des Risstypanteils an allen Mikrorissen [%] vs. Mikrorissanzahl

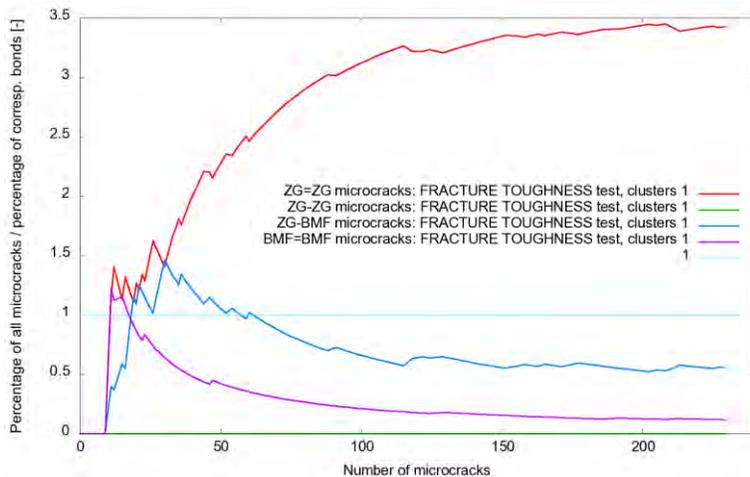


Abb. 20: Entwicklung der Anteilsproportionalität der Risstypen vs. Mikrorissanzahl

8 Sensitivitätsanalyse und Optimierung

Verwendet wurde das Optimierungsprogramm optiSLan. Dabei ging es um erste Erfahrungen zur Kopplung der selbst entwickelten Software mit Sensitivitäts- und Optimierungstools.

Eine erste Untersuchung wurde zur Sensitivität der Kalibrierungsparameter (E_c , V_c , F_c , ...) bezüglich der Materialparameter (E, ν, σ_D) für MgO-BMF und MgO-Beton durchgeführt (mit 24 bzw. 160 Designs). Bisherige Erfahrungen aus der Kalibrierung wurden dabei bestätigt, vgl. auch Abbildung 21.

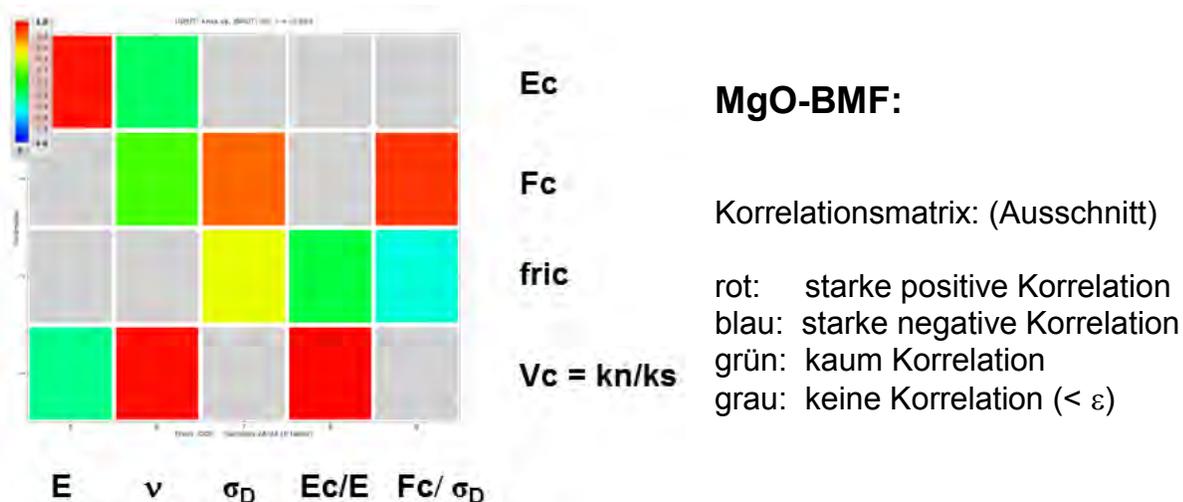


Abb. 21: Sensitivitätsanalyse für die Kalibrierungsparameter von MgO-BMF

In einer zweiten Untersuchung wurde die Kalibrierung eines homogenen Materials als Optimierungsproblem dargestellt

$$z = \left(\frac{E - E^*}{E^*} \right)^2 + 0.0625 \cdot \left(\frac{\nu - \nu^*}{\nu^*} \right)^2 + \left(\frac{\sigma_D - \sigma_D^*}{\sigma_D^*} \right)^2 \rightarrow \min.$$

Die Lösung dieses Problems mit zwei Optimierungsalgorithmen lieferte ähnliche Ergebnisse wie der eigene, schnellere Kalibrierungsalgorithmus.

9 Ergebnisse und Ausblick

Folgende Resultate bezüglich Methodik und Instrumentarium wurden erreicht:

- Eine Datenbasis aus umfangreichen Laborversuchen (MgO-Beton, Asphalt-Mastix) steht nun zur Verfügung.

- Ein Konzept zur numerischen Materialgenerierung für heterogene Systeme aus Bindemittel und Zuschlag wurde entwickelt und implementiert, dazu wurden Analyse-tools entwickelt (Software für PFC3D, 3DEC, z.T. extern in C++).
- Damit war die Simulation von Deformation / Schädigung / Bruch von heterogenen Systemen auf Kornenebene möglich (granulare / intergranulare Schädigung, Risstypen etc.)
- Kalibrierungstechnologien für homogenes und heterogenes Material wurden geschaffen (Software-Routinen).
- Eine Stoffgesetzentwicklung für Asphalt wurde realisiert (UDM in C++)
- Für die Optimierung und Sensitivitätsanalyse von Baustoffen wurden Grundlagen gelegt.

Weiterer Forschungsbedarf besteht in Folgendem:

- Weiterentwicklung von Simulation und Stoffgesetz für Asphalt,
- Weiterentwicklung der numerischen Werkzeuge in Richtung der Analyse von Langzeitverhalten und Lebensdauerprognose,
- Kopplung der Simulation des Mikroverhaltens mit Kontinuumsansätzen für große Strukturen.

Danksagung

Die Verfasser danken dem BMWi für die Förderung unter dem FKZ 02E10457



9. Projektstatusgespräch
Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen

**Groh, U., Konietzky, H., Walter, K.
Glaubach, U., Kudla, W.**

**"Heterogene Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag –
Untersuchung & Modellierung von MgO-Beton und Asphalt"**

Einordnung

- Entwicklung von Baustoffen für geotechnische **Verschlussbauwerke** bei der Lagerung gefährlicher Abfälle in tiefen geol. Formationen
- **Asphalt** und **MgO-Beton** als repräsentative heterogene Werkstoffe
- Beschreibung und Analyse des **Materialverhaltens**, insbesondere **Bruch und Schädigung**
- **Modellierung heterogener Werkstoffe** nicht homogenisiert als Kontinuum, sondern **strukturiert aus den beteiligten Komponenten** mit unmittelbarer Anwendung der Mechanik auf die Partikel im Mikrobereich
- Tieferes physikalisches Verständnis für das Materialverhalten und die Rolle der einzelnen Komponenten (Materialoptimierung)

Ziele

- **Strukturmechanische Modelle** von Asphalt / Beton aus den Komponenten Bindemittel (Bitumen, MgO) und Zuschlag (Sand, Splitt) mittels **Kugel** bzw. **Polyeder**, Kontaktgesetze
- **Begleitende Laborversuche** zur Kalibrierung und Verifizierung der Modelle als Teil der Modellierungsmethodik
- Endziel: **Tools** auf Basis der Diskrete-Elemente-Methode zur **Vorhersage des Materialverhaltens** von Asphalt und MgO-Beton im Mikrobereich (Probenerzeugung, Testsimulation, Kalibrierung)
- Aussagen zur Verhaltensübertragung vom Mikro- in den **Makrobereich**
- **Sensitivitätsanalyse**, Fernziel: Baustoffoptimierung

Laborversuche

Modellmaterial

- **Beton:** nach 28 Tagen Aushärtung
 - **Bindemittel:** 18,3 M% MgO G 75 der Fa. Styromag mit 18,3 M% R-Lösung als Anmachflüssigkeit (gegenüber dem anstehenden Salzgestein kein Lösungspotential)
 - **Zuschlag:** 63,4 M% aus Sand/Kies der Körnung 0/8 der Fa.Quickmix
- **Asphalt:**
 - **Bindemittel:** Oxidationsbitumen, Sorte STELOX 85/25
 - **Zuschlag:** 85 % Natursand 0/2, 15 % Tonschiefermehl 0/90 μm
 - Bindemittelanteil so, dass Porenraum (33 Vol%) ausgefüllt (Haufwerk gesättigt mit Bindemittel, fast **porenfrei**)

Laboruntersuchungen

- **Geometrische Eigenschaften:**
Größenverteilungen (Siebkurven), Größen, Formfaktoren (CPA-Analyse), Porosität, ...
- **Mechanische Eigenschaften:**
Rohdichte, Reindichte, Druckfestigkeit (1ax, 3ax), Spaltzugfestigkeit, E-Modul, Querdehnungszahl (beides stat.+ dyn.), Haft-Scherversuche, Bruchzähigkeit, Langzeit-Kriechversuche
- **ZG-Materialwerte:**
Einzelkorn-Druckversuche und Werte aus **Literatur** für Quarz/Quarzglas/Quarzit (Mittelwerte), (petrograph. Analyse: 63% Quarzkörner unregelmäßig geformt)
- Alle Versuche jeweils für MgO-BMF und MgO-Beton (einzelne zusätzlich auch für MgO)

BMF = **B**inde**M**ittel + **F**einanteil des Zuschlag (< 0.6 mm)

Laboruntersuchungen MgO-Beton

Untersuchung	Zuschlag	MgO-BM	MgO-BMF	MgO-Beton
CPA-Korngrößenanalyse	X	-	-	-
CPA-Kornformanalyse	X	-	-	-
Petrografische Analyse	X	-	-	-
Bruchkraft Einzelkorn	100 Stück	-	-	-
Bruchkraft Kornverbund	1	-	-	-
Reindichte, ggf. Rohdichte	X	6	6	6
Porosität (offene, Gesamt-)	-	6	6	6
E-Modul, Poissonzahl stat.	-	6	12 (+5)	6
E-Modul, Poissonzahl dyn.	-	6	12 (+5)	6
Uniaxiale Druckversuche	-	6	12	6
Spaltzugversuche	-	6	12	6
Triaxiale Druckversuche	-	-	5	8
Haftscherversuche	-	-	2	2
Uniaxiale Kriechversuche	-	-	3	3
Bruchzähigkeitsversuche	-	-	5	5

Laboruntersuchungen Asphalt

Untersuchung	Zuschlag	Bitumen-BM	Bitumen-BMF	Asphalt
CPA-Korngrößenanalyse	X	-	-	-
CPA-Kornformanalyse	X	-	-	-
Korndichte Tonschiefermehl B 0.09	2	-	-	-
Korndichte Natursand 0/2	2	-	-	-
Grenzlagerungsdichten nach DIN 18126	6	-	-	-
Reindichte, ggf. Rohdichte	-	8	6	8
Spannungsabhängiger Scherversuch	-	14	14	-
Temperaturabhängiger Scherversuch	-	10	10	-
Spannungsabhängiger uniaxialer Zugkriechversuch mit Retardation (Langzeit)	-	6	6	-
Uniaxialer Druckkriechversuch (Langzeit)	-	-	3	6
Uniaxialer Druckkriechversuch mit Spannungsrelaxation (Langzeit)	-	-	-	1
Uniaxialer Druckversuch mit verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten	-	-	15	15
Laufzeitmessung Ultraschall	-	6	6	12

Methodik

Methodik: Strukturmodell

- **Abbildung der einzelnen Komponenten** des heterogenen Materials (Bindemittel, Zuschlag) jeweils als Menge separater Elemente, Träger der geometrischen und physikalischen Eigenschaften der Komponenten, ggf. Stoffgesetze
- **Abbildung der räumlichen Struktur** des heterogenen Materials durch Größe und Verteilung der Elemente, einschließlich der Mikrohohlraumstruktur, ggf. Elementcluster
- **Abbildung der Wechselwirkungen** der Komponenten an den Berührungspunkten durch Kontaktgesetze (Kraft-Verschiebungsgesetze, Gleiten, Bindung/Bruch)
- Realisierung im Rahmen der **Diskrete-Elemente-Methode** (Codes PFC3D bzw. 3DEC), die zeitlich alternierend Kontaktkräfte und Bewegung fortschreibt

Methodik: Materialuntersuchungen

- Vorwiegend am Institut für Geotechnik und am Institut für Bergbau und Spezialtiefbau, weiteres TU-Potential nutzbar
- **Eigenschaften der Einzelkomponenten** (Zuschlag, Bindemittel), Modellierung: Zuschlag-Grobfraktion als Partikel in realer Größe, Bindemittel mit Zuschlag-Feinfraktion als Partikel fiktiver Größe, Konsequenz: Untersuchung Zuschlag-GF, BM + Zuschlag-FF
- **Eigenschaften der Kontakte**: Haftverhalten BM an Zuschlag (in Normal- und Scherrichtung), aber auch BM-Partikel untereinander (Bindungsmodell: Zug- und Scherfestigkeit)
- **Eigenschaften des Gesamtwerkstoffes**: einschließlich Erfassung der räumlichen Struktur
- **Vergleich Versuch / Simulation** für Kalibrierung und Verifizierung

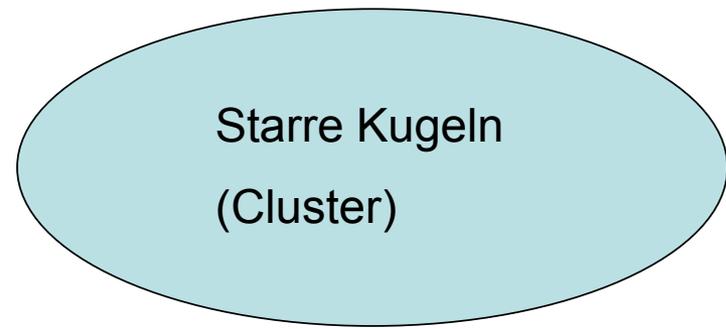
Methodik: Numerische Modellierung

- **Erzeugung der geometrischen Mikrostruktur** als Präprozessor zum Simulationsprogramm
 - Kugelpackungen für PFC3D
 - Polyederpackungen für 3DEC (Voronoi-Elemente aus Kugeln)
- **Entwicklung von Kontakt-/Stoffgesetzen:**
 - Modellieren der Kontakt-Physik (grundlegende Kraft-Verschiebungs-Beziehung, Bindungsdynamik, ggf. Gleiten), bei 3DEC auch der Stoffgesetze
 - Nutzerdefinierte Verwaltung der Kontakteigenschaften (FISH)
 - Nutzerdefinierte Stoffgesetze für Asphalt und MgO-Beton (C++)
- **Test an kleinen Modellen** auf Basis von experimentellen Ergebnissen (Druck-, Zug-, Scher-, Bruchzähigkeitsversuche)
- **Analyse-/ Bewertungstool** für DEM: geom./ phys. Eigenschaften

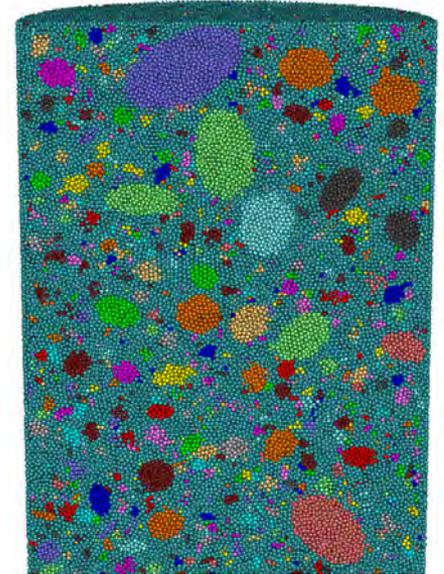
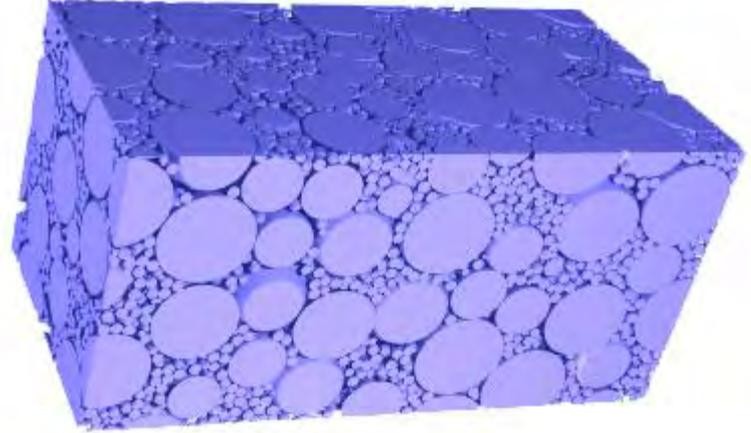
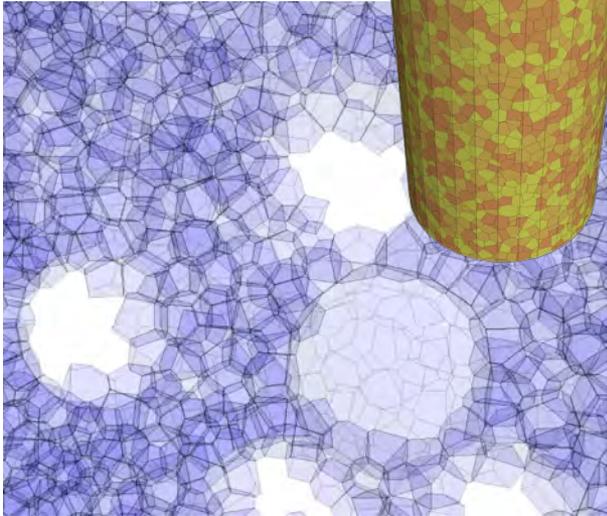
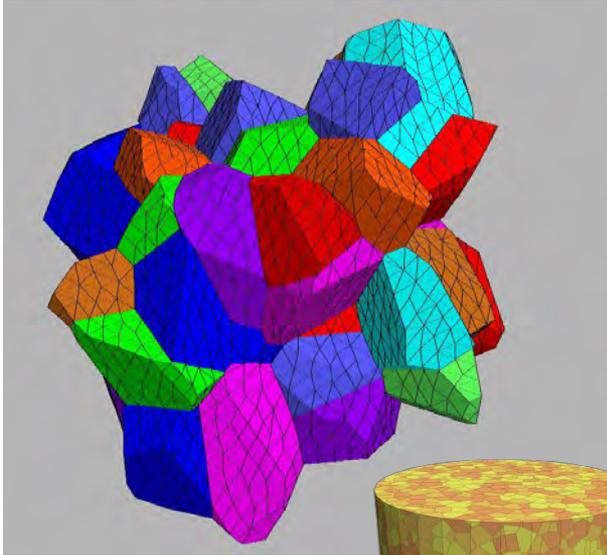
Auswahl des Simulationsprogramms



- mehr physik. Möglichkeiten
- bessere Strukturabbildung
- **rechenintensiver**
- **numerisch instabiler**



- **schneller, robuster**
- **geometrisch einfacher**
- **physikalisch eingeschr.**



Numerisches Modell (PFC3D)

- 3D-Realisierung im Rahmen der **Diskrete-Elemente-Methode**, die zeitlich alternierend Kontaktkräfte und Bewegung fortschreibt (explizites Differenzenverfahren 2. Ordnung in Raum und Zeit, PFC3D: starre Kugeln)
- Partikelanzahl begrenzt (Speicher, Rechenzeit), deshalb **Teilhomonisierung**, unterhalb Homogenisierungsgrenze Körner nicht mehr diskret abbildbar
- **Partikel: alle gleich groß** ($d = 0,6 \text{ mm} = \text{Homogenisierungsgrenze}$)
- **ZG:** Zuschlagskörner mit Durchmesser $\geq d$ (Partikel oder Partikelcluster aus mehreren Partikeln)
- **BMF:** Gemisch Bindemittel + Zuschlagskörnern Durchmesser $< d$ (Bindemittel mit Feinanteil, homogenisierte Komponente, Partikel)
- **Kontakte:** kornintern (ZG = ZG), Kornberührungen (ZG - ZG), Kontakt Korn mit Bindemittel (ZG - BMF), Kontakt im Bindemittel (BMF = BMF)
- **Kontaktmodell (MgO):** linear elastisches Modell + Kontaktbonds ($k_n, k_s, \text{fric}, n_bond, s_bond$), Kraft-Verschiebungs-Gesetz $F_n = k_n \cdot u_n, \dots$

Probengenerierung

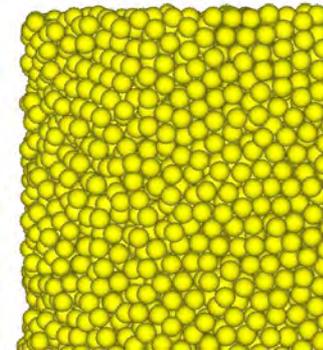
Numerischer Aufwand (PFC3D)

Zum Beispiel:

- Modellierung Probengruppe aus Laborversuch Beton:
Zylinder (D, H) mit $D=50$ mm
- $H/D=1$ für Spaltzugversuch \Rightarrow Probe P0600 (600.000 Partikel)
- $H/D=2$ für 6 Druckversuche \Rightarrow Probe P1200 (1.200.000 Partikel)
- $H/D=4$ für Bruchzähigk.test \Rightarrow Probe P2400 (2.400.000 Partikel)
- Simulation auf Plattform mit 2 QuadCore-Intel Xeon X5365 (64 bit),
3.00 GHz, 32 GB RAM
- **Probenerzeugung:** 3.5 / 7.2 / 12.5 **Tage** für P0600/ P1200/ P2400
- **Hauptspeicher:** 2.4 / 4.7 / 9.5 **GByte** analog
- **Versuchsdauer:** 3.5 / 11.5 / 16.2 **Tage** analog

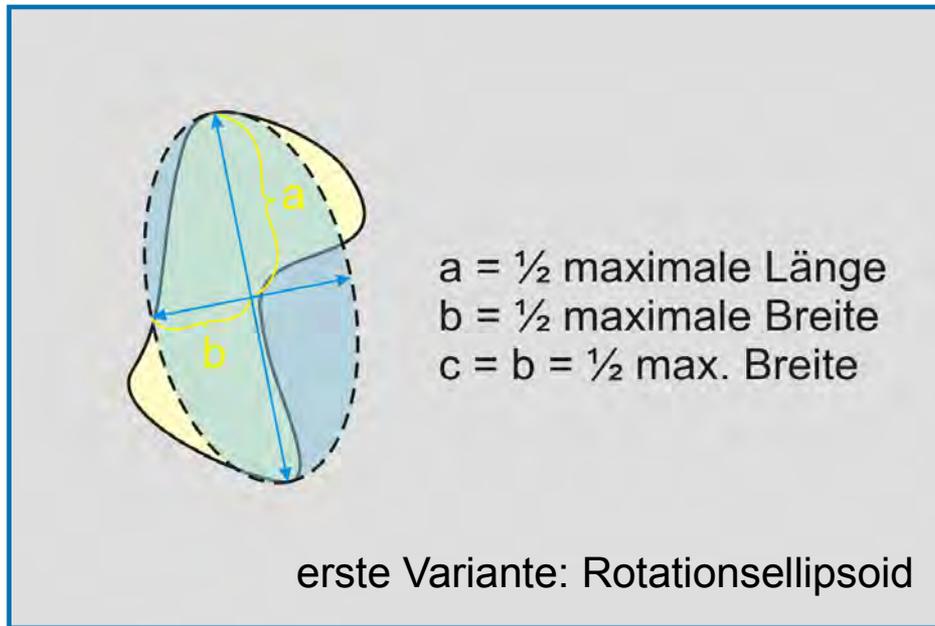
Probengenerierung

- **Methode:**
Programm SpherePackFB: quaderförmige Probe
Ausschneiden in PFC3D: zylindrische Probe
- **Materialeigenschaften:**
noch keine physikalischen Eigenschaften zugewiesen
- **Resultat:** (Beton: P040, P100, P300, P1200)
 - Probe **spannungsfrei**,
 - Probenoberfläche **rau**
 - nur **virtuelle** Kontakte (keine Bonds möglich)
- **Glätten der Probe:**
 - **niedrige** Spannungen, **glatte** Oberfläche, **reale** Kontakte



Clustering

Cluster-Erzeugung: geometrisch



CPA-Analyse liefert
Verteilungen von a, b/a

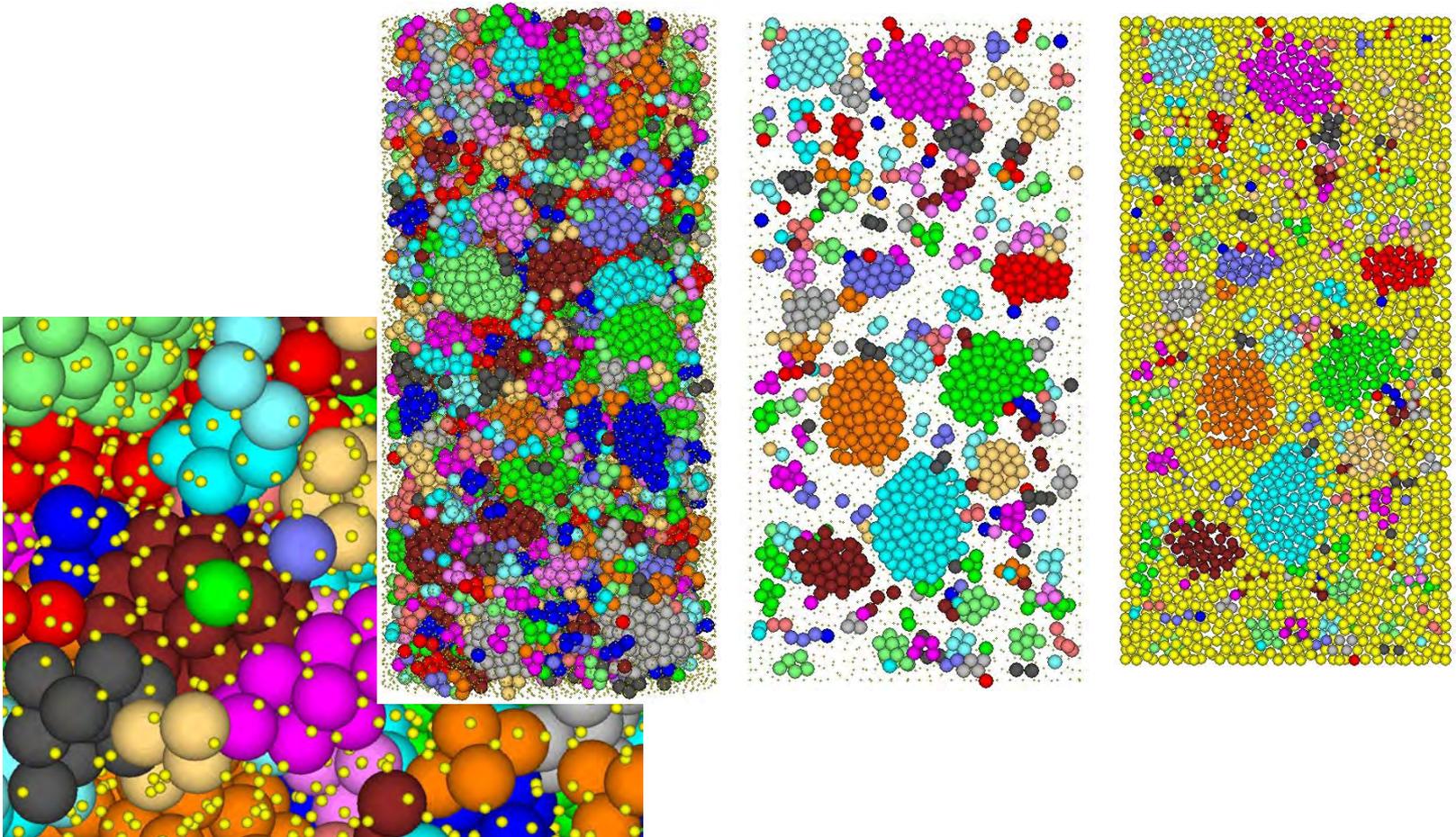


Zufällige Auswahl von
a, b/a, c/a

Modellierung: zufälliges Ellipsoid zufälliger Orientierung am zufälligen Ort
als Hüllfläche,

Cluster = Gesamtheit der innen liegenden Partikel

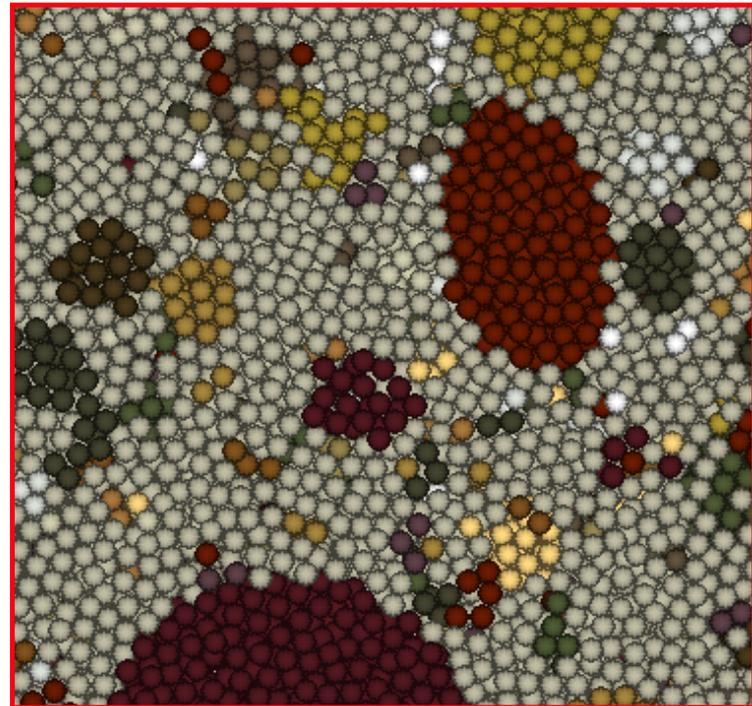
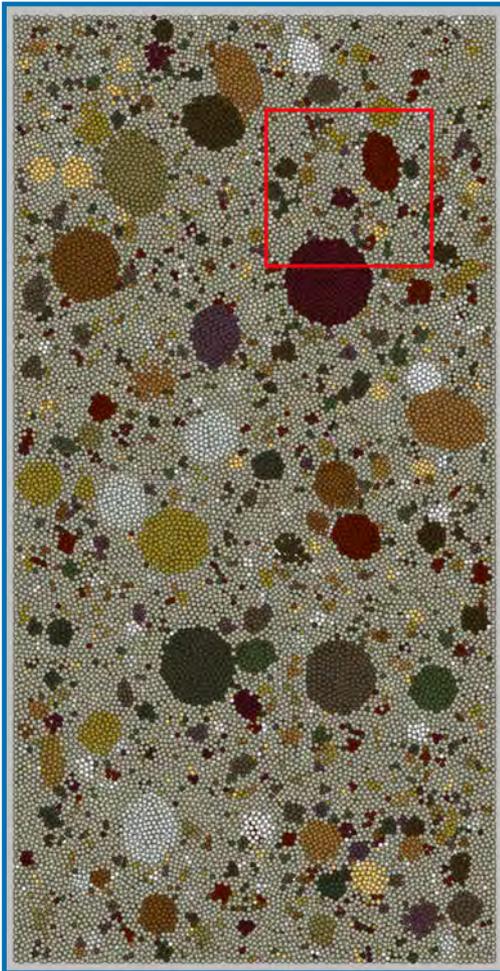
Clustererzeugung



Heterogenes Material: Zuschlagskörner (Cluster)

(Können bei Überlastung zerbrechen!)

Ausschnitt:



Probe P0040: 36917 Partikel,
Zustand unmittelbar vor Test

Clustererzeugung

```
Pfc3D>get_info_contact_types
```

```
-----  
tensBOND: cnf < 0.0,   cnf = ContactNormalForce,   n_bo = n_bond  
-----
```

contact_type	ALL cont.	ACTIVE c.	contBOND	tensBOND	-cnf>10%n_bo
0 ball-wall	5268	3201	0	0	0
1 ZG=ZG	43752	21134	21134	6297	452
2 ZG-ZG	8963	2984	2062	507	47
3 ZG-BMF	71473	28198	27606	6589	97
4 BMF=BMF	119148	51130	50899	11501	0
Summe =	248604	106647	101701	24894	596

```
-----  
contact_type           % ACTIVE contacts  
0 ball-wall           3.00149089988e+000  
1 ZG=ZG              1.98167787186e+001  
2 ZG-ZG              2.79801588418e+000  
3 ZG-BMF             2.64404999672e+001  
4 BMF=BMF           4.79432145302e+001  
-----
```

Clustererzeugung

■ Analyse-Tools

- *get_info_contact_types*: alle, aktive, gebondete, unter Zug stehende Kontakte, geschwächte Kontakte, alles nach 4 Kontakttypen und Summe
- *get_info_all_clusters*: Anzahlen aller und zerteilter Cluster, Anzahl zusätzliche Teile, darin enthaltene Partikel, Anzahlen von Clustern mit 1,2,...,9 und mehr Partikeln
- *classify_contact_normal_force*: Klassifikation der Kontakt-Normalkraft nach Größenklassen, nach Druck, Zug, Summe
- *del_small_clu_parts*: Heraussuchen von größtem Cluster-Teil, Finden der anderen Teile und Herauslösen aus der Datenstruktur, so dass Cluster nur noch aus einem zusammenhängend gebondeten Teil besteht

Numerisches Versuchsprogramm / Kalibrierung

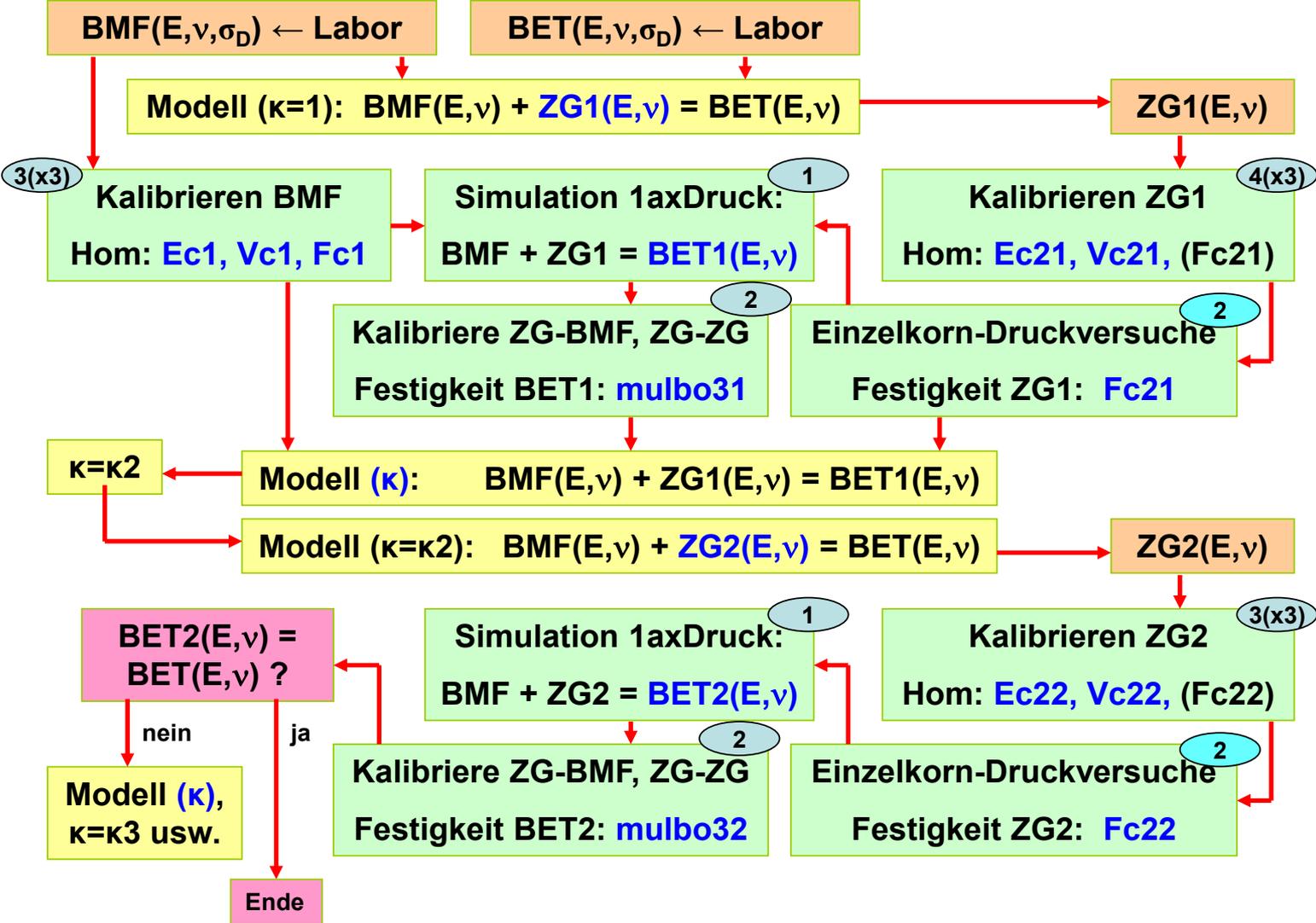
Simulationsprogramm

- **Mittel:** **PFC3D + Programmsystem (Eigenentwicklung in FISH)**, kann
 - Druckversuch (uniaxial, triaxial, Zylinder)
 - Direkter Zugversuch (Zylinder, Quader)
 - Spaltzugversuch
 - Bruchzähigkeitstest (Zylinder)
 - Druck-Kriechversuch (Zylinder)
 - Zug-Kriechversuch (Zylinder, Quader)
 - Scher-Kriechversuch (Zylinder)
- **Zweck:**
 - Stoffgesetz-Experimente
 - Kalibrierungswerkzeug
 - Analysewerkzeug (z.B. SPZ-Versuch => Einzelkorn-Druckversuch)

Kalibrieren

- **Ziel:** PFC-Mikro-Modellparameter so einstellen, dass bei Versuchen gewonnene Makro-Materialparameter bei Simulationen reproduziert werden - **mit gleichem internen Parametersatz!!!**
- **Mikro:** z.B. für lineares Kontaktbond-Modell
 - Steifigkeiten k_n , k_s ,
 - Bondfestigkeiten n_{bond} , s_{bond} ,
 - Reibung fric
- **Makro:** z.B. E-Modul, Poisson-Zahl, Festigkeiten
- **Versuchsserie:** z.B. für Beton 1axD, 3axD(5M), SPZ, KIC, (1axZ)

Kalibrieren – heterogenes Material, Strategie A

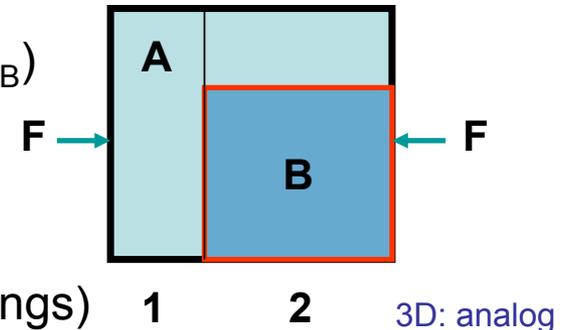


Kalibrieren – Elastisches Gemischmodell

- 2 elastische Komponenten: $A(E_A, \nu_A)$, $B(E_B, \nu_B)$
- Mat.2 = Parallelschaltung A, B (quer)
- Mat.1 = Mat.A
- Gemisch = Reihenschaltung Mat.1, Mat.2 (längs)
- vorgegebenes Volumenverhältnis $V_A / V = \text{const}$
- Parameter κ modifiziert Anteilsverhältnis der Komponenten in Längs- und Querrichtung bei festem Volumenverhältnis
- Formeln für Gemisch (E, ν) :

$$E = f(E_A, E_B, \kappa)$$

$$\nu/E = g(E_A, E_B, \nu_A, \nu_B, \kappa)$$
- Nutzung: 1) $(E, \nu), (E_A, \nu_A), \kappa \rightarrow (E_B, \nu_B)$ (Start: $\kappa=1$)
 2) $(E, \nu), (E_A, \nu_A), (E_B, \nu_B) \rightarrow \kappa$



Kalibrieren ZG: Einzelkorn-Druckversuche

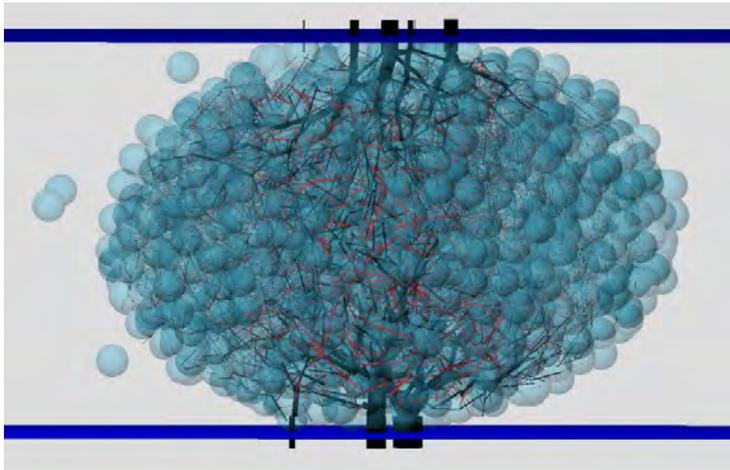
Ziel: Einbeziehen der Festigkeit des realen Zuschlags

Weg: Anpassung der Bondfestigkeit des bereits kalibrierten ZG durch Anpassung des mittleren Verhaltens im Einzelkorn-Druckversuch

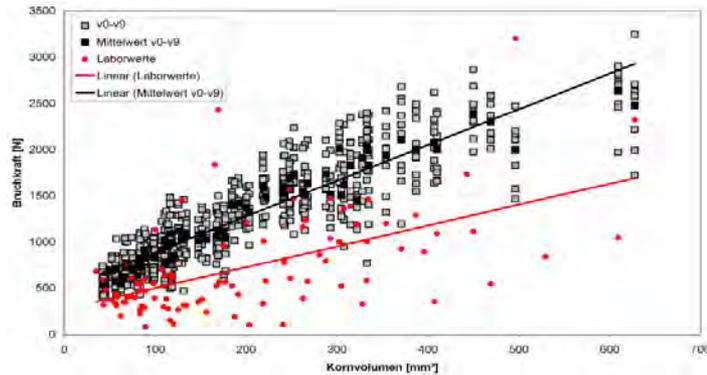
Aus 100 Druckversuchen mit Körnern 4-8 mm

=> Auswahl von 24 Körnern vom Typ Mineralbruchstücke/Quarz (V , h F_{max})

=> Simulation in je 10 Instanzen mit zufälligen zwei Halbmessern



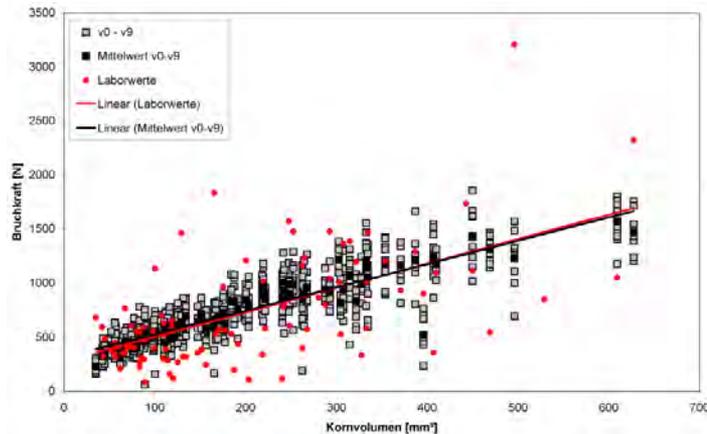
Kalibrieren ZG: Einzelkorn-Druckversuche



In der Ansicht

Bruchkraft vs. Volumen

- Regressionsgerade Laborversuche
- Regressionsgerade Simulationen

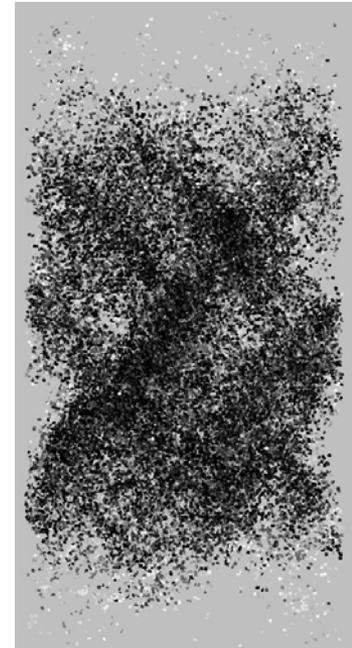
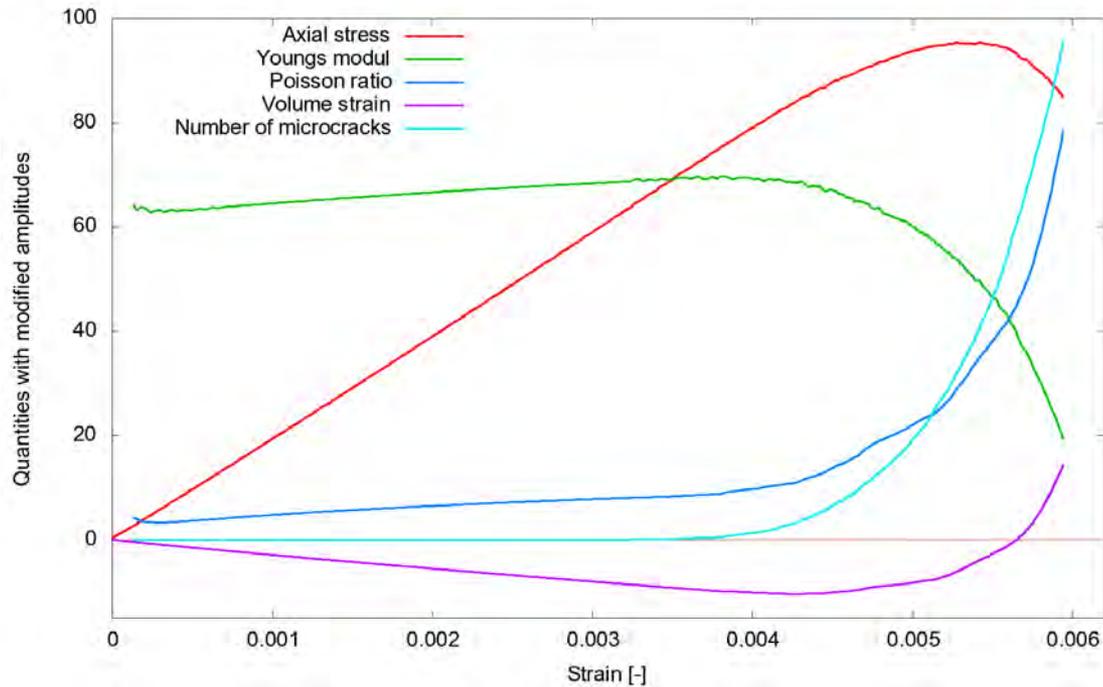


Nach Ändern der Bondfestigkeit
um den Faktor 1/1.56

- in 2 Schritten
- mittels Ausmessen der Grafik

Simulationsergebnisse

Resultate MgO-Beton: Uniaxialer Druckversuch



Mikrorisse (zeitlich)

1.2 Millionen Partikel

Spannungen, Dehnungen:

global (Platten, Mantel)

E-Modul:

Sekantenanstieg

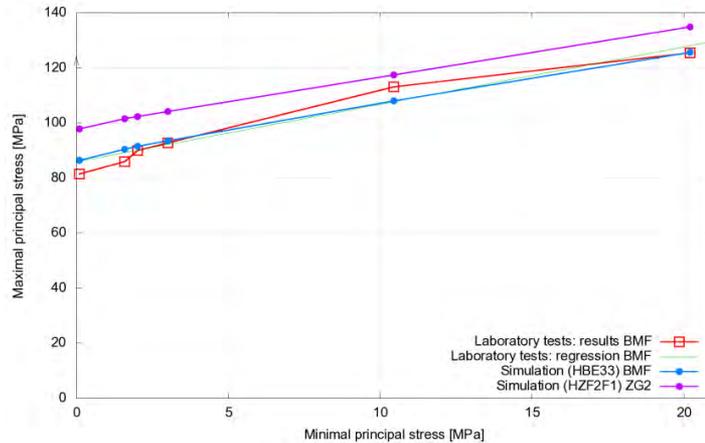
Poissonzahl:

$$\nu = 0.5 [1 - E\varepsilon_v / (\sigma_z + 2\sigma_r)]$$

Mikroriss:

Bondbruch (Scher- oder Zugbruch)

Resultate MgO-Beton: Triaxiale Druckversuche



Hüllkurven

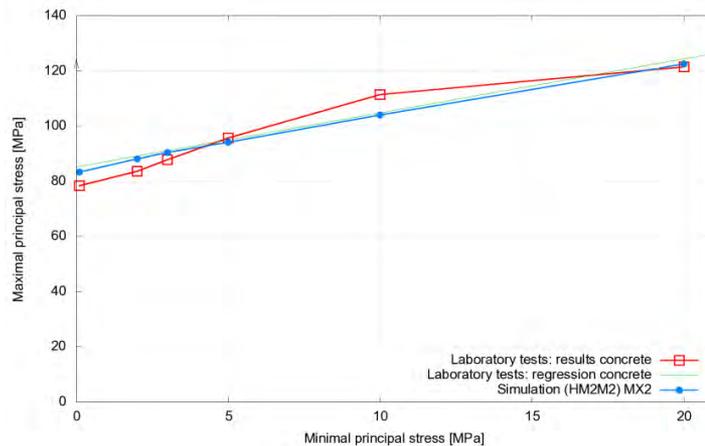
(Grafik Hauptnormalspannungen):

Bindemittel mit Feinanteil BMF:

=> **Laborversuche**, => **Simulation**

Fiktiver Zuschlag ZG2:

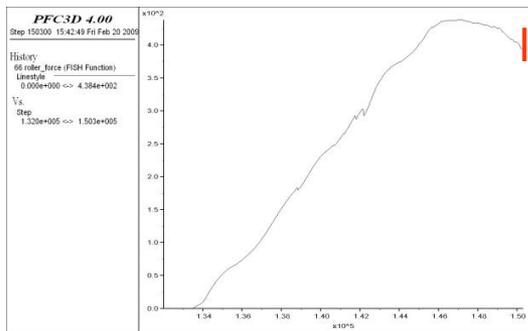
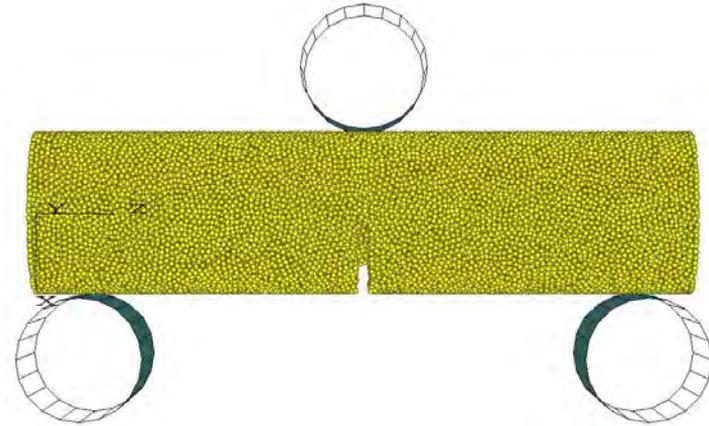
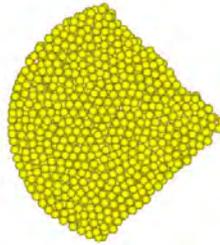
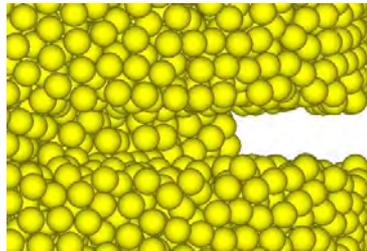
=> **Simulation**



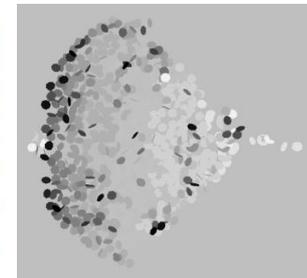
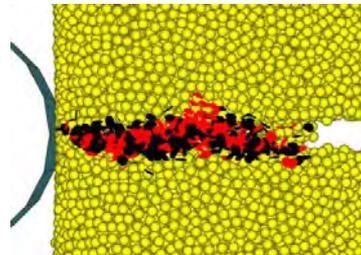
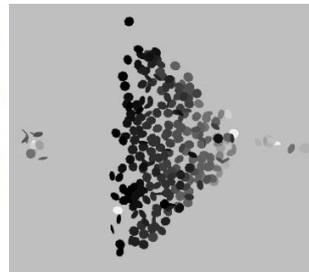
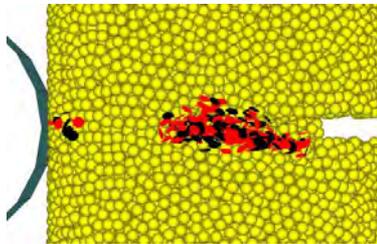
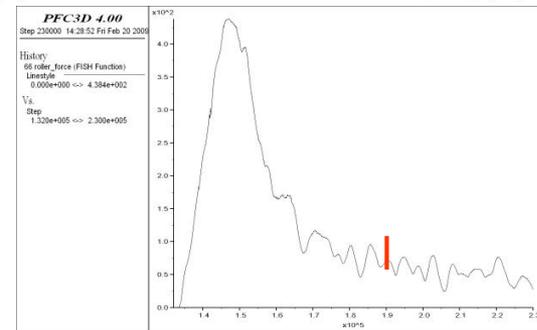
Beton:

=> **Laborversuche**, => **Simulation**

Bruchzähigkeitstest

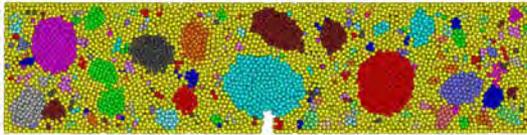


Rollenkraft
vs. Schritte

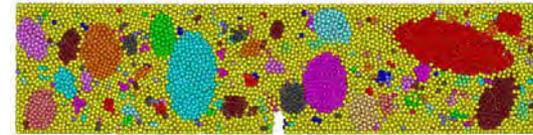


Mikrorisse: rot/schwarz=Zug-/Scherbruch, dunkel=später

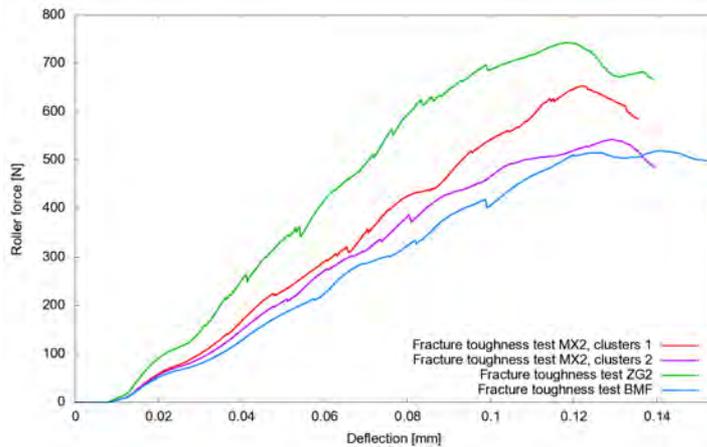
Resultate MgO-Beton: K_{IC} -Test



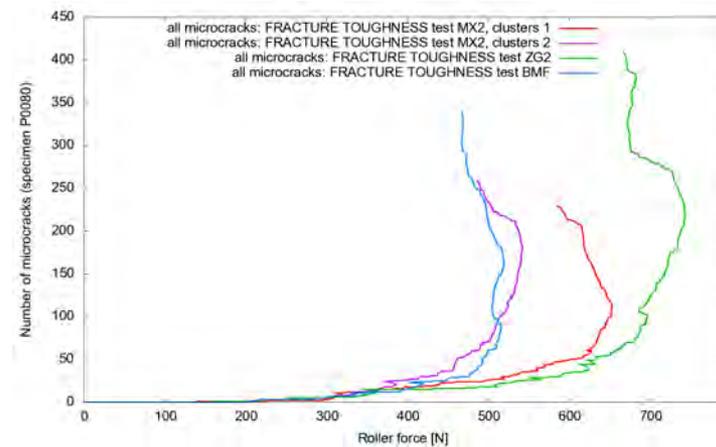
Kornverteilung: clusters 1



Kornverteilung: clusters 2



Rollenkraft vs. Durchbiegung



Mikrorissanzahl vs. Rollenkraft

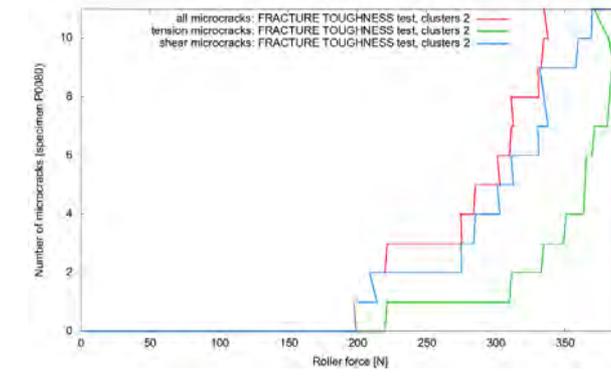
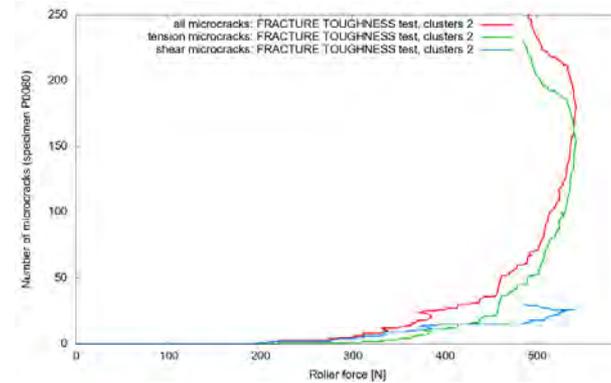
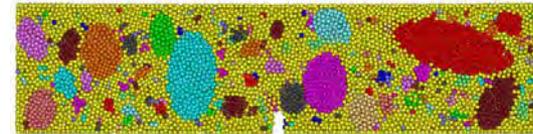
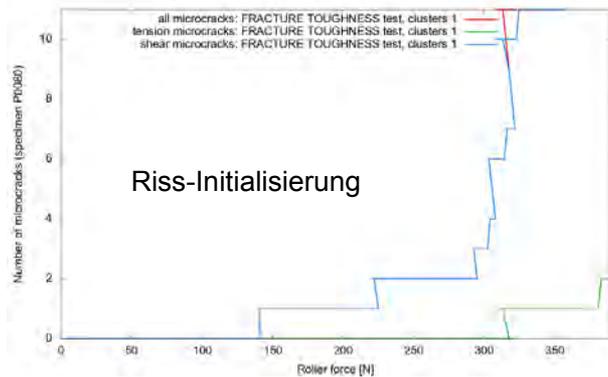
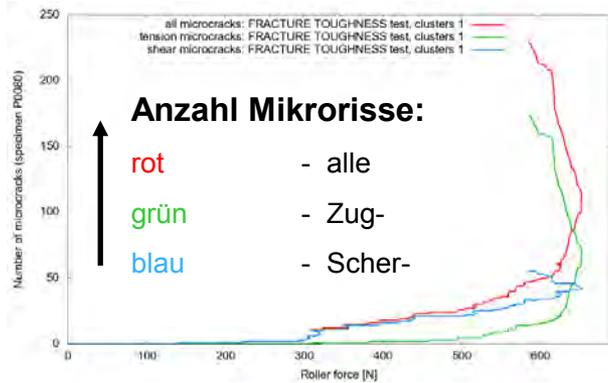
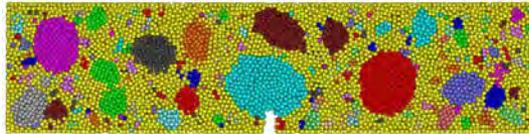
rot - Beton (clusters 1)

grün - homogen: fiktiver Zuschlag

pink - Beton (clusters 2)

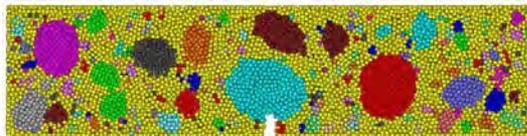
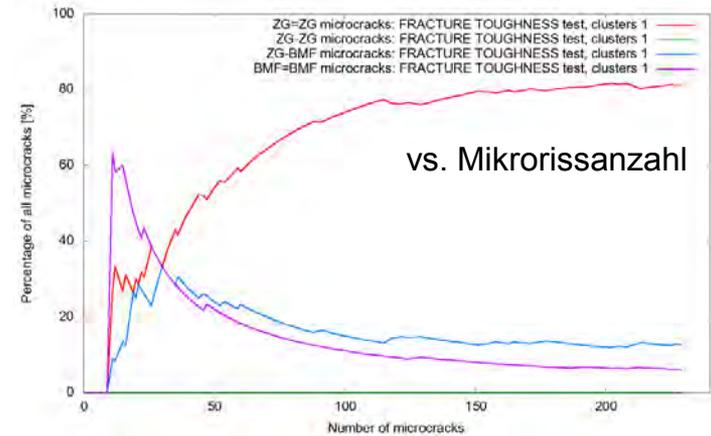
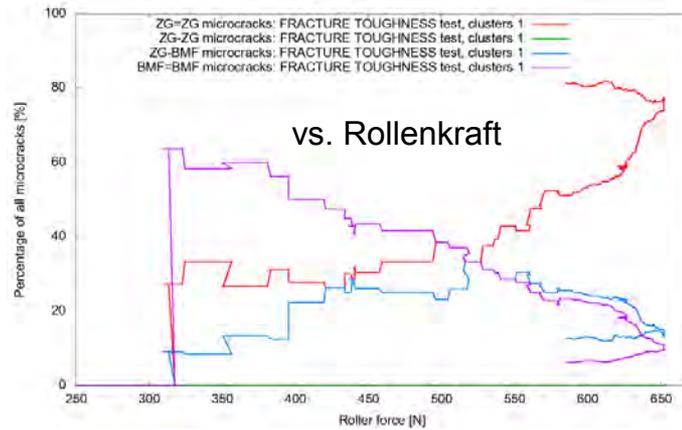
blau - homogen: Bindemittel + Feinanteil

Resultate MgO-Beton: K_{IC} -Test



Rollenkraft →

Resultate MgO-Beton: K_{IC} -Test



Anteil Mikrorisse [%] nach Risstypen:

komponenteninterne:

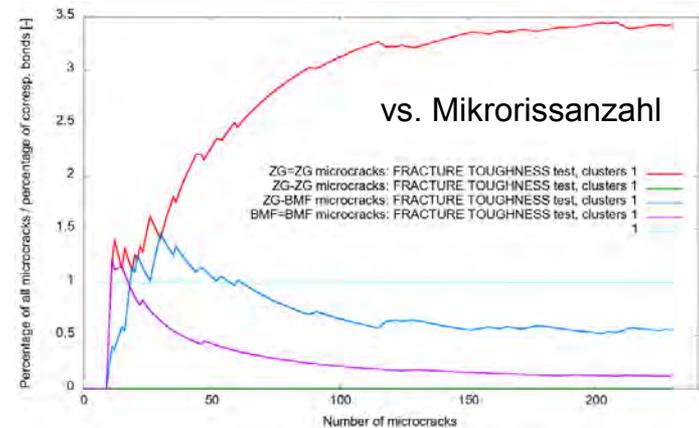
rot - ZG=ZG,

pink - BMF=BMF

komponentenexterne:

grün - ZG -ZG,

blau - ZG - BMF



Anteil bezogen auf entspr. Bondanteil
= **Anteilsproportionalität [-]**

Sensitivitätsanalyse

- Optimierungstool: **optiSLang**
- Bisherige Untersuchungen: Sensitivität der Kalibrierungsparameter (**E_c , V_c , F_c , $fak3$, $fak4$**) **bezüglich** der Materialparameter (**E, ν, σ_D**) für MgO-BMF und MgO-Beton, Erfahrungen bestätigt!

MgO-BMF:

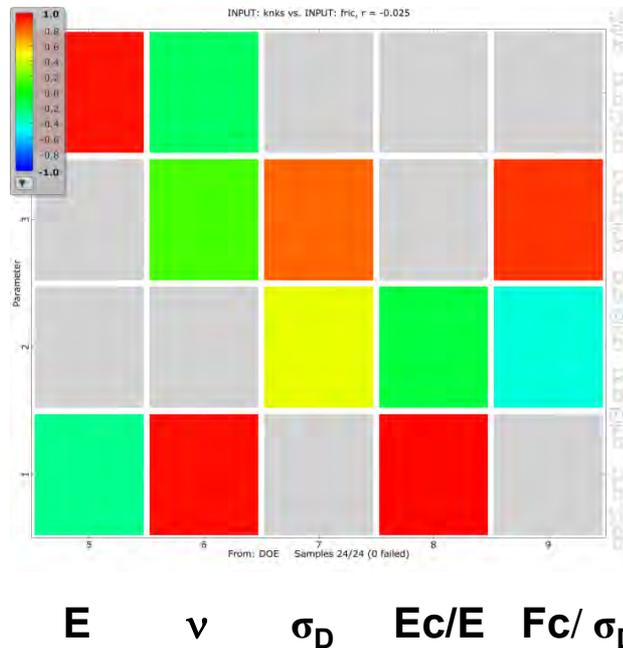
Korrelationsmatrix:

rot: starke positive Korrelation

blau: starke negative Korrelation

grün: kaum Korrelation

grau: keine Korrelation ($< \epsilon$)



E_c

F_c

fric

$V_c = kn/ks$

E

ν

σ_D

E_c/E

F_c/σ_D

Zusammenfassung

Methodik / Instrumentarium:

- **Datenbasis aus umfangreichen Laborversuchen (MgO-Beton, Asphalt-Mastix)**
- **Materialgenerierung für heterogene Systeme aus Bindemittel und Zuschlag, dazu Analysetools (Software für PFC3D, 3DEC, z.T. extern in C++)**
- **Simulation von Deformation / Schädigung / Bruch von heterogenen Systemen auf Kornebene
(granulare / intergranulare Schädigung, Risstypen etc.)**
- **Kalibrierungstechnologie für homogenes und heterogenes Material (Software-Routinen)**
- **Stoffgesetzentwicklung für Asphalt (UDM in C++)**
- **Grundlagen für Optimierung und Robustheitsanalyse von Baustoffen**

Forschungsbedarf:

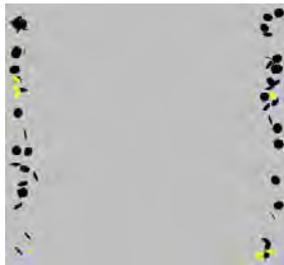
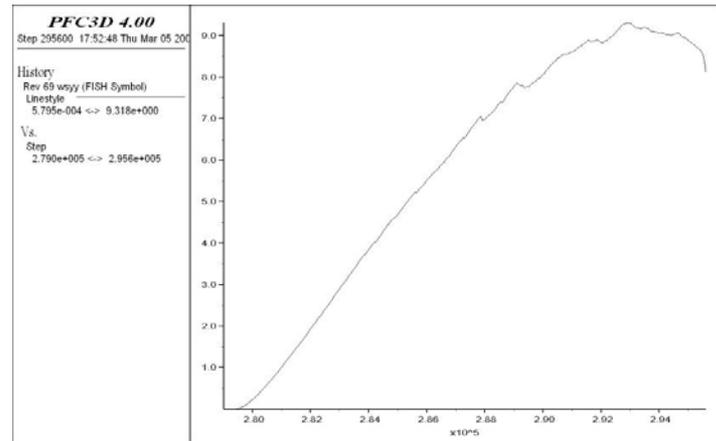
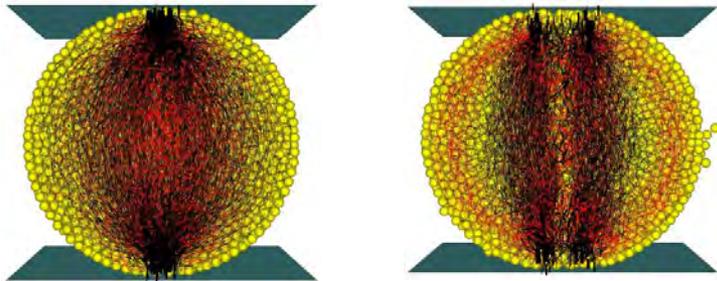
- **Weiterentwicklung Simulation/Stoffgesetz für Asphalt**
- **Langzeitverhalten / Lebensdauerprognose**
- **Kopplung mit Kontinuumsansätzen für große Strukturen**

Danke für die
Aufmerksamkeit

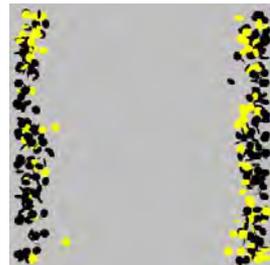
Glückauf



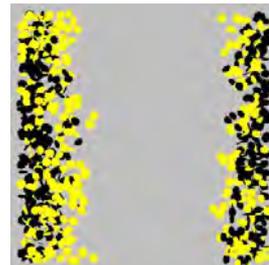
Spaltzugversuch



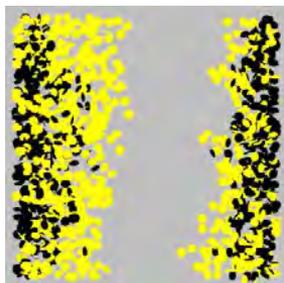
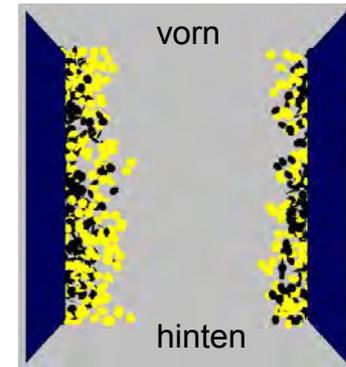
285000



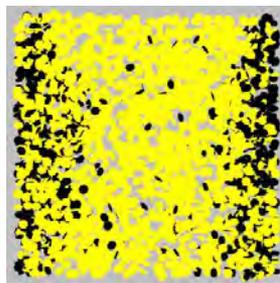
289000



292000



294000

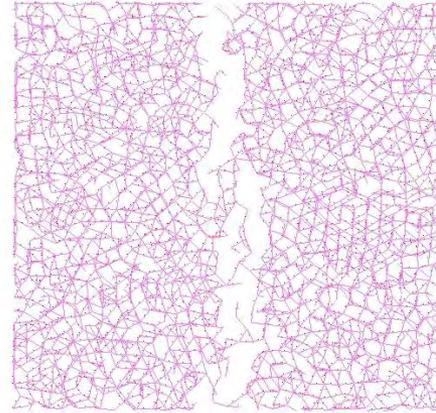
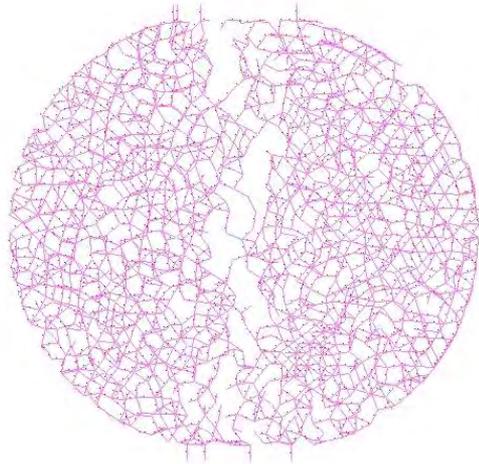


296000

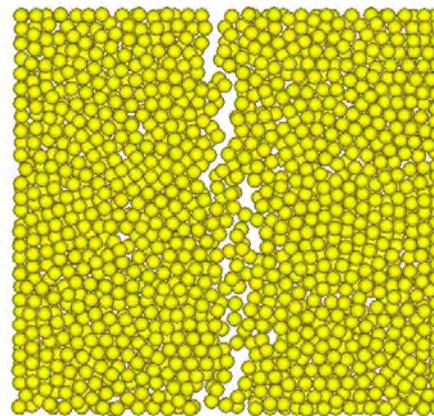
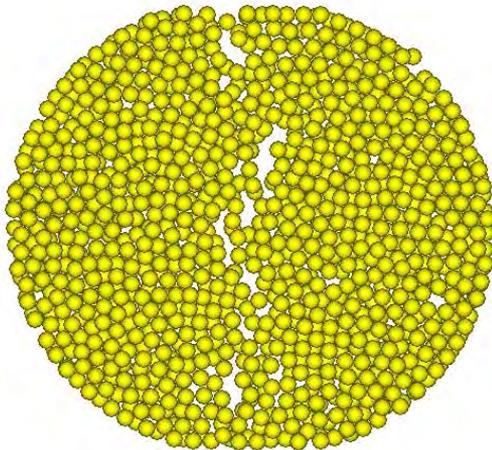
Rissentwicklung von den Platten aus!

Mikrorisse: gelb/schwarz = Zug-/Scherbruch

Spaltzugversuch



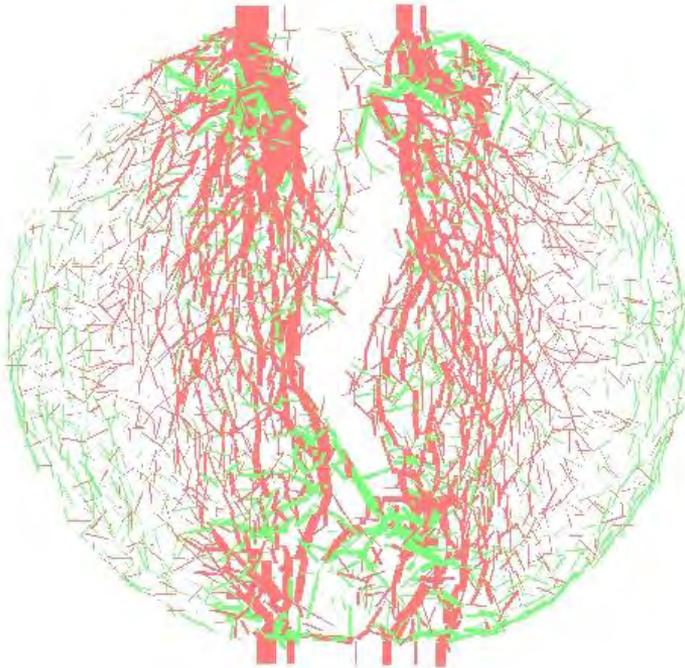
Kontakte



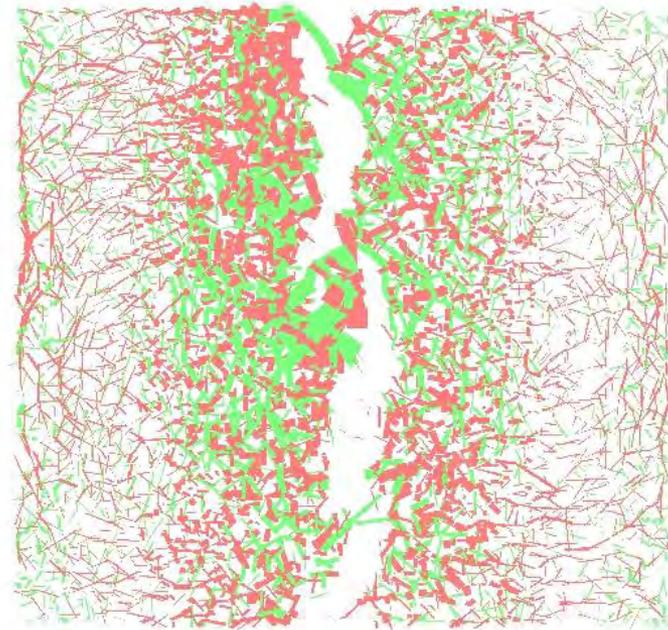
(alles am Ende
der Simulation)

Spaltzugversuch: Kräfte

von vorn



von oben



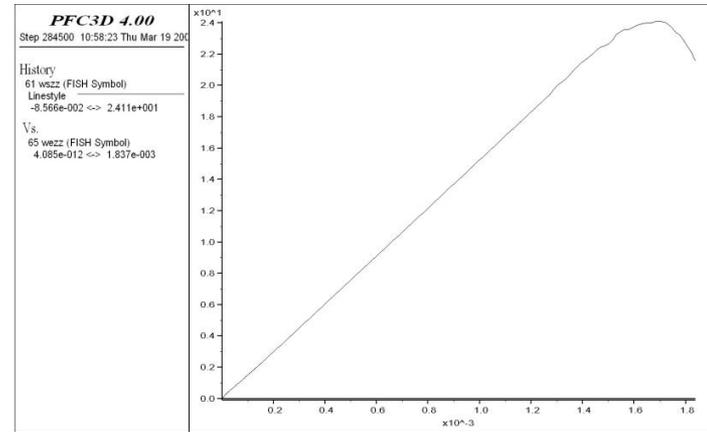
Kräfte: rot – Druck, grün - Zug

Direkter Zugversuch

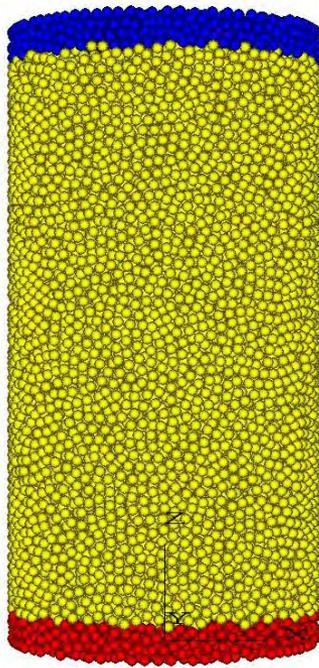
Gruppen

wall_6

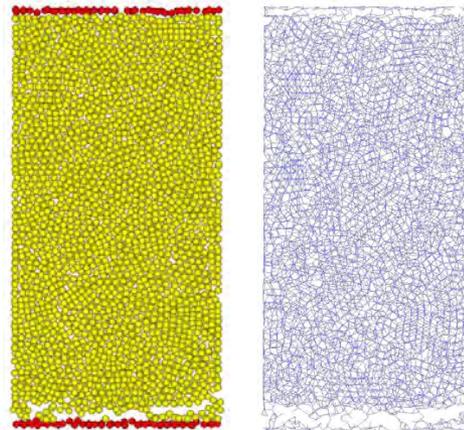
wall_5



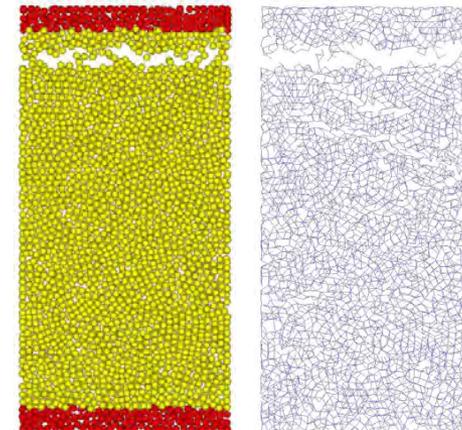
Arbeitskurven: Axialspannung vs. Axialdehnung



wall_5, wall_6 nur aus Partikeln
 mit realem Wandkontakt



wall_5, wall_6 aus
 dickerer Partikelschicht



Kontakt-Bonds

Direkter Zugversuch

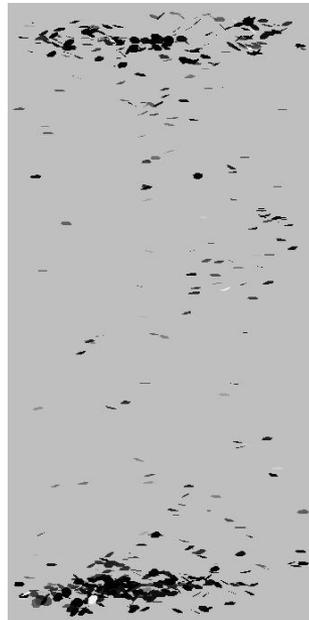
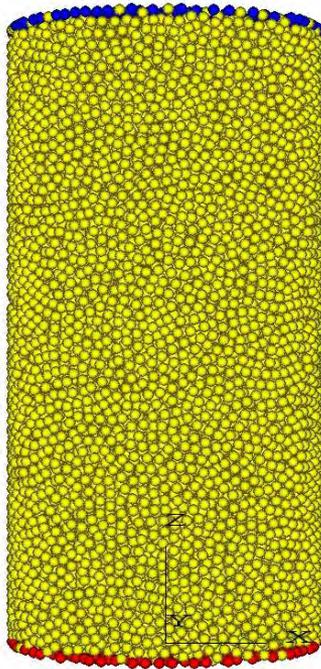
Gruppen

wall_6

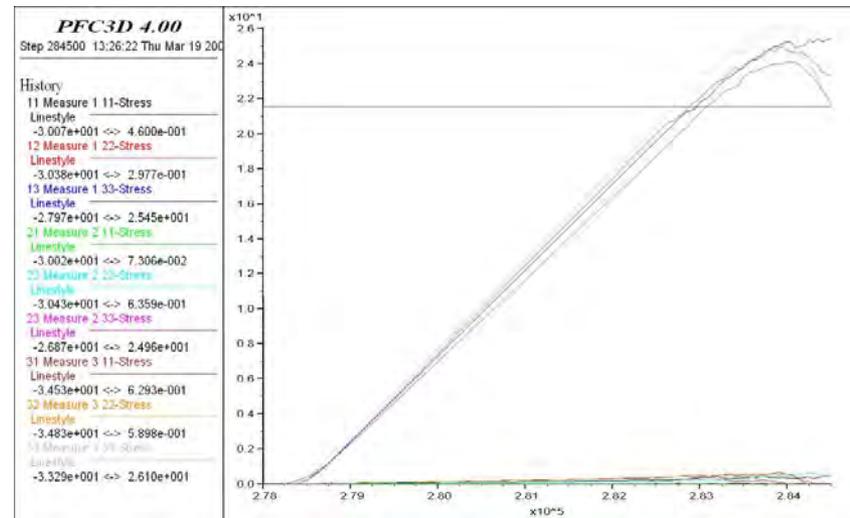
wall_5

Crack-Items:
dunkel=später

wall_5, wall_6 nur aus Partikeln
mit realem Wandkontakt

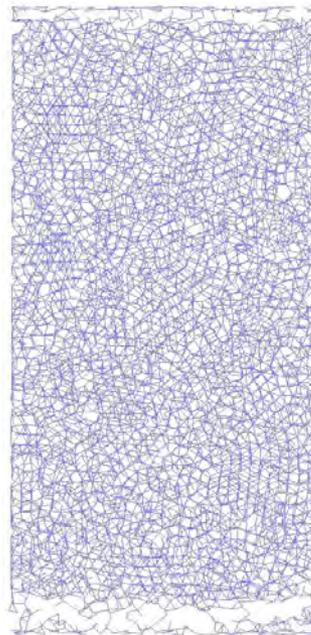
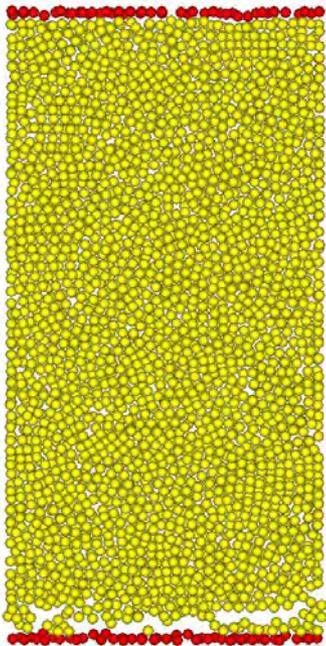


Arbeitskurven: Axialspannung vs. Axialdehnung
lokale (Messkugeln) / globale (Plattenkräfte)



Direkter Zugversuch

Nachbruchphase: wall_5, wall_6 nur aus Partikeln mit realem Wandkontakt



Kontakt-Bonds



Crack-Items:
dunkel=später

Schnitte durch Rotationsachse

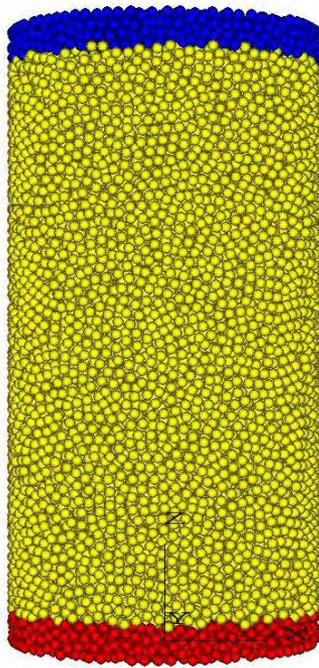
Projektion
Volumen

Direkter Zugversuch

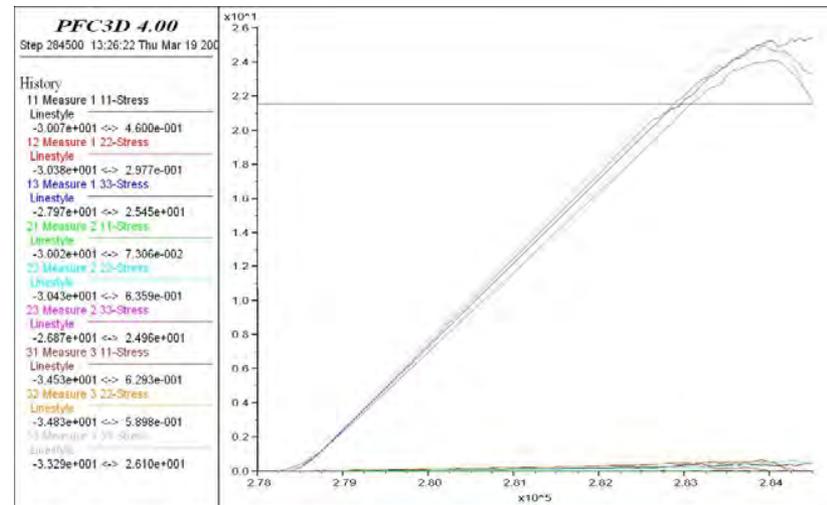
Gruppen
 wall_6
 wall_5

Crack-Items:
 dunkel=später

wall_5, wall_6 aus dickerer
 Partikelschicht (1.8 mm)



Arbeitskurven: Axialspannung vs. Axialdehnung
 lokale (Messkugeln) / globale (Plattenkräfte)

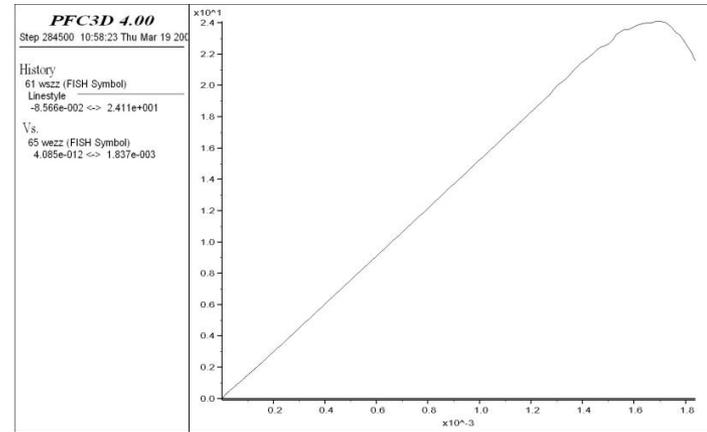
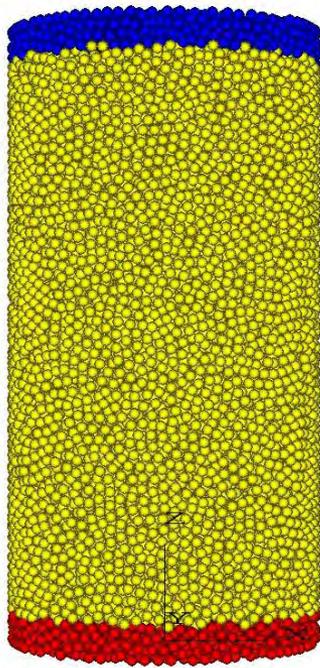


Direkter Zugversuch

Gruppen

wall_6

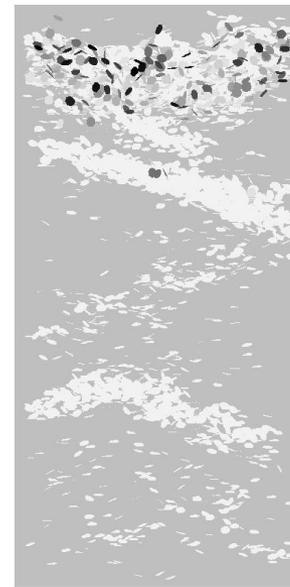
wall_5



Arbeitskurven: Axialspannung vs. Axialdehnung



Peak-Bereich

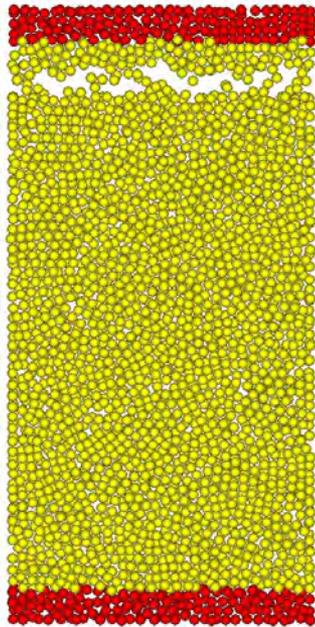


viel später

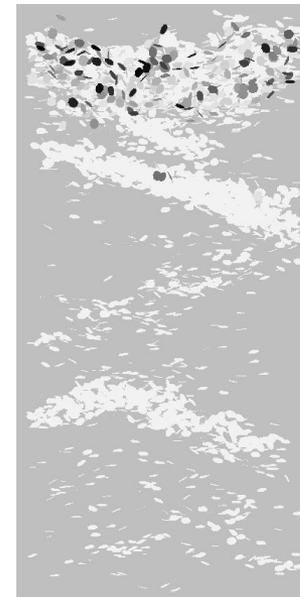
Crack-Items=
Mikrorisse,
dunkel=später

Direkter Zugversuch

Nachbruchphase: wall_5, wall_6 aus dickerer Partikelschicht (1.8 mm)



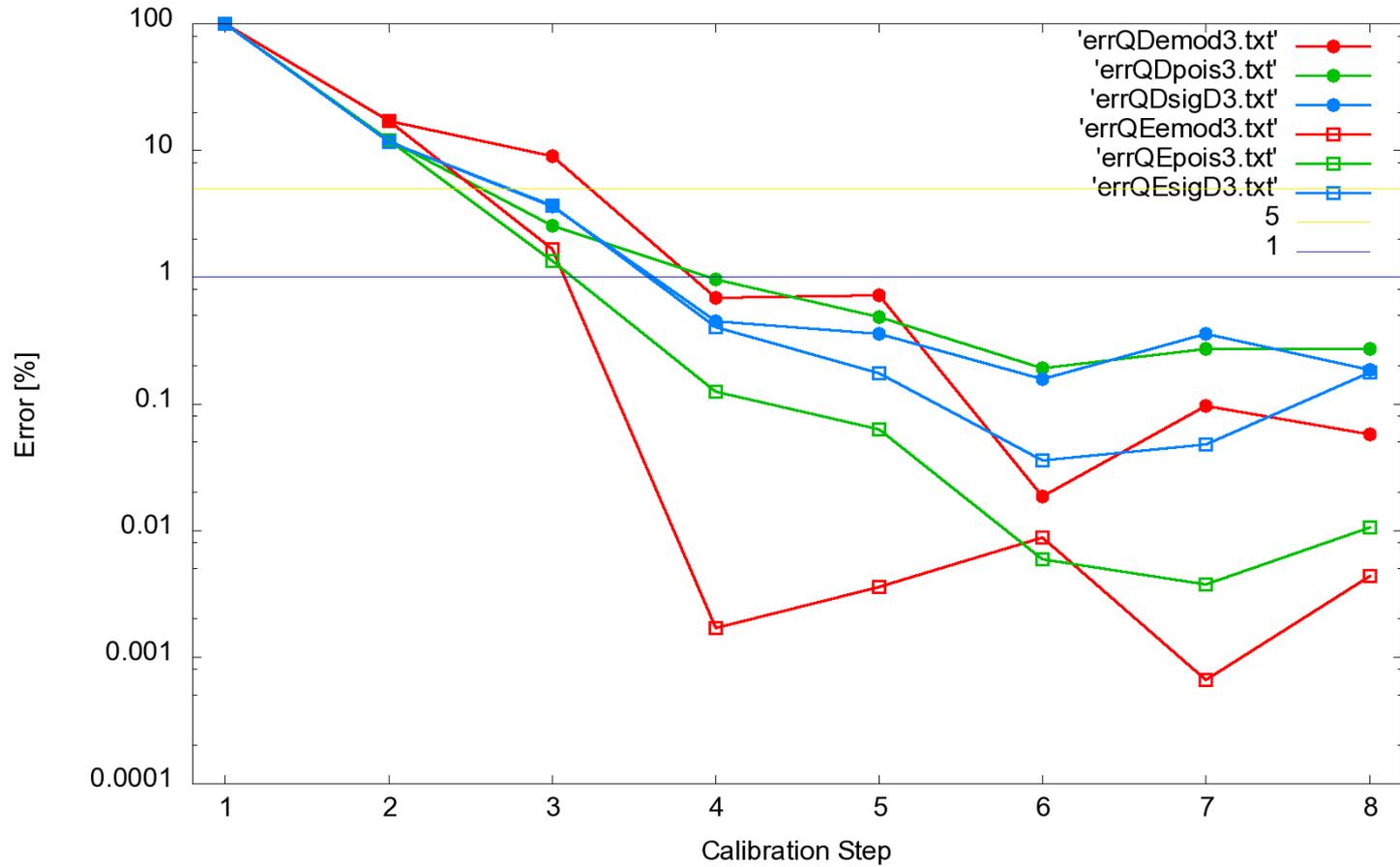
Kontakt-Bonds



Crack-Items:
dunkel=später

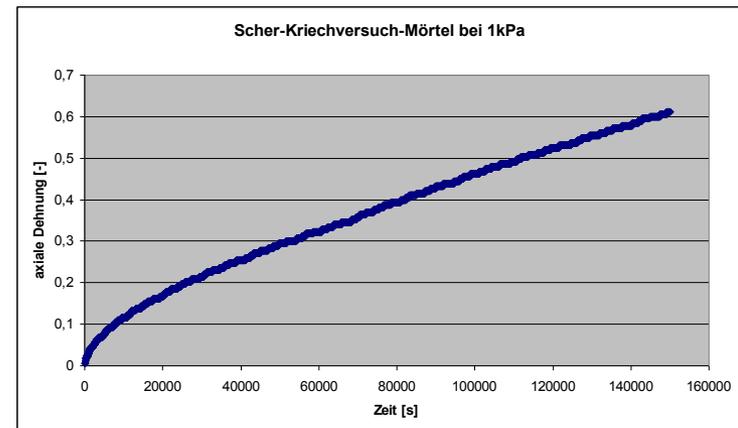
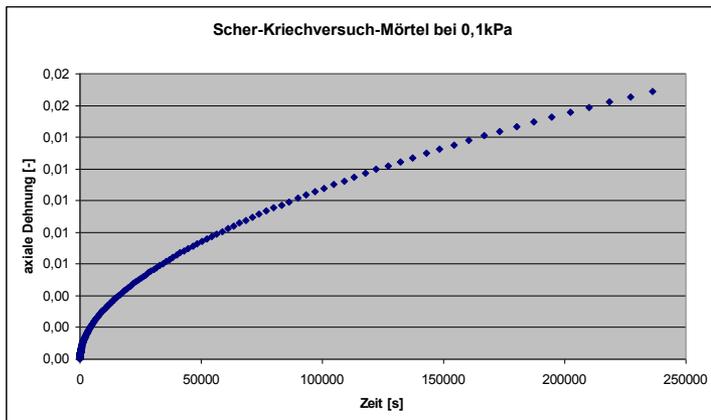
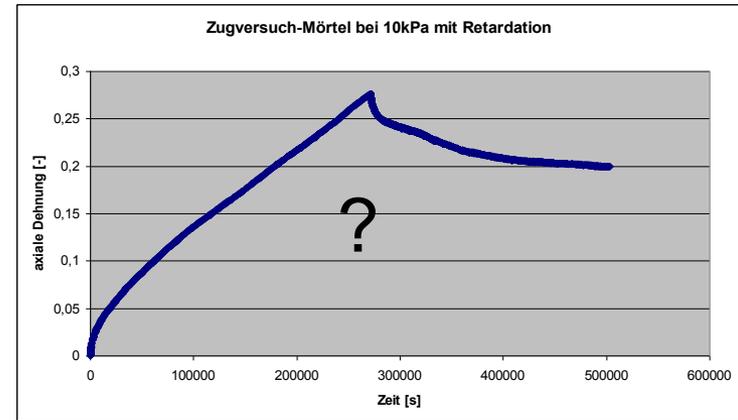
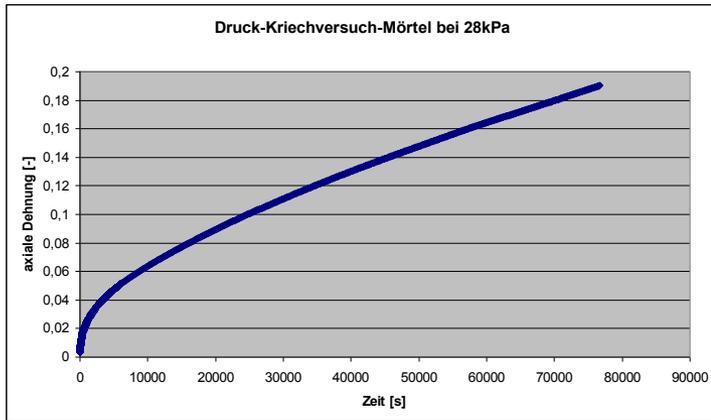
Kalibrieren

Algorithmus für elastisches homogenes Material,
für konkrete Probe und Belastungsgeschwindigkeit



Bitumen (BMF)

Zieldaten z.B. aus folgenden Versuchen:



Asphalt: Kontaktgesetze

Nutzerdefiniertes Modell (UDM)
=> in C++ implementiert

- **ZG=ZG (interne Kontakte im Zuschlagskorn):**
lineares Kontaktmodell mit Kontaktbonds (brechen kaum!),
[Steifigkeiten, Bondfestigkeiten, Reibungszahl].
- **BMF=BMF, BMF-ZG, ZG-ZG (alle anderen Kontakte):**
Vorstellung: hohe Adhäsionskräfte des Bitumens führen an der Zuschlagsoberfläche zu ständig präsenter dünner Bitumenschicht, deshalb:
alle 3 Kontaktarten prinzipiell wie BMF=BMF behandeln, fast inkompressibles Material!

Normal-Richtung: Steifigkeiten + veränderliche Bondstärke

- **Druck-Steifigkeit** entsprechend den kontaktierenden Materialien,
- **Zug-Steifigkeit** identisch zu der von BMF=BMF (wegen Bitumenschicht),
- Bondstärke > 0 wird bei Druck vergrößert (Kappungsgrenze), bei Zug vermindert
- **Bondstärkenänderung proportional zu Spannung und deren Wirkungsdauer**
- nur 2 Kontaktzustände möglich: aktiv = gebondet / virtuell = abgelöst

Scher-Richtung: Kraft-Verschiebungs-Beziehung wie im **Burgers-Modell**
[Steifigkeiten (Maxwell-, Kelvin-), Viskositäten (Maxwell-, Kelvin-)]

Der BMBF-Förderbereich „Nukleare Sicherheitsforschung“



PTKA
Projektträger Karlsruhe
im Karlsruher Institut für Technologie

- Das Förderkonzept „Grundlagenforschung Energie 2020+“ des BMBF
- Der Förderbereich „Nukleare Sicherheits- und Entsorgungsforschung“
- Fördermittel für die Energieforschung des BMBF
- Umsetzung / Aktivitäten
- PTKA-WTE – Projektbereich Entsorgung

- Strategie für höhere Energieeffizienz und Ausbau der Erneuerbaren Energien (BR August 2007)
- Gewährleistung von Versorgungssicherheit, Wirtschaftlichkeit und Umweltverträglichkeit
- Stärkung der Energieforschung – Das Förderkonzept Grundlagenforschung Energie 2020+ (BMBF 2008)
- Zusammenarbeit und Vernetzung von Wissenschaft (institutionell geförderten Zentren und Hochschulen) und Wirtschaft

- Förderkonzept mit sechs Förderschwerpunkten
- Nukleare Sicherheits- und Entsorgungsforschung mit drei Fördergebieten
 - Sicherheitsforschung für Kernreaktoren
 - Sicherheitsforschung zur nuklearen Entsorgung
 - Strahlenforschung
- Spezielle Ausrichtung – Nachwuchsförderung (Graduiertenkollegs, Post-doc-Förderung)

- Sicherheitsforschung für Kernreaktoren
 - Numerische Werkzeuge zur Auslegung von Reaktoren
 - Thermohydraulische und materialspezifische Experimente
- Sicherheitsforschung zur nuklearen Entsorgung
 - Abfallcharakterisierung
 - (Sicherheitsnachweis der Endlagerung)
 - Entsorgung radioaktiver Abfälle
- Strahlenforschung

Der Förderbereich „Nukleare Sicherheits- und Endlagerforschung“ (III)

- BMBF-Bekanntmachung vom 27. Mai 2008 zum Thema „Grundlegende FuE-Arbeiten in der nuklearen Sicherheits- und Entsorgungsforschung zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses und zum Kompetenzerhalt“
 - Reaktorsicherheit (3D-Simulationsmodelle, Modellvalidierung, innovative Brennstoffkonzepte, innovative Mess- und Diagnosetechniken)
 - Entsorgung – Abfallcharakterisierung und –behandlung (Innovative Mess- und Diagnosetechniken, Verfahren zur Abtrennung langlebiger Radionuklide (Partitioning) und zur Transmutation, Verfahren zur endlagergerechten Fixierung)
 - Strahlenforschung (Arbeiten zur Wirkung ionisierender Strahlung auf Mensch und Umwelt, Verhalten radioaktiver Stoffe in der Umwelt) – geförderte Disziplinen: Strahlenschutzmedizin, Medizinische Strahlenbiologie, Radioökologie
- Start und Betreuung durch PTJ / GRS

- HH-Ansätze 2010 für die Förderschwerpunkte des BMBF-Förderkonzepts (Projektförderung, Stand Veröffentlichung FK 2008)
 - Rationelle Energieumwandlung 91 Mio €
 - Erneuerbare Energien 13 Mio €
 - Nukleare Sicherheits- und Entsorgungsforschung 10 Mio €
 - Strahlenforschung 4 Mio €
 - Fusionsforschung 12 Mio €

- Dazu Mittel für die Helmholtz-Gemeinschaft für die Schwerpunkte
 - Rationelle Energieumwandlung + EE 59 Mio €
 - Nukleare Sicherheits- und Entsorgungsforschung 34 Mio €
 - Fusionsforschung 115 Mio €

- Instrumente zur Umsetzung
 - Institutionelle Förderung der HGF-Zentren ...
 - Projektförderung – Forschungsverbünde von öffentlichen Forschungseinrichtungen, Hochschulen und Industrie. Wissenschaftlich exzellente Einzelvorhaben als Ausnahme.
 - Bildung strategischer Allianzen (Plattformen)
 - Nachwuchsförderung – Zusätzlich zu Doktorandenstellen Förderung von Kollegs und Post-doc-Aktivitäten
 - Ergebnistransfer – Förderung von Seminaren, Workshops, Konferenzen, Sommerschulen

- Ausschreibung der Projektträgerschaft 2009
- Übernahme der PT-Aufgaben durch PTKA-WTE ab 2010
- Fördergebiet mit 65 FuE-Vorhaben und Forschungsverbänden auf den Gebieten
 - Strahlenforschung (Radionuklidtransport in der Umwelt bis Strahlenmedizin)
 - Reaktorsicherheit (Thermische Wechselbeanspruchung von Kraftwerksbauteilen, Siedevorgänge in DWR)
 - Entsorgung (Partitioning, Transmutation)
... in Vorbereitung
 - Strahlenforschung und Reaktorsicherheit (4 Verbundvorhaben)
 - Bekanntmachung zu den Schwerpunkten Reaktorsicherheit und Entsorgung (Sachverständigengespräche Ende Juni, Bekanntmachung im September/Oktober 2010)

PTKA-WTE – Projektbereich Entsorgung

- PT-Aktivitäten für BMBF verstärkt
- Projektförderung zu nuklearen FuE-Aktivitäten gebündelt
 - BMWi - Endlagerforschung, FVOL ca. 11 Mio. Euro/Jahr (SOLL)
 - BMBF - Stilllegung kerntechnischer Anlagen, FVOL ca. 7 Mio. Euro/J (SOLL)
 - BMBF – Nukleare Sicherheits- und Entsorgungsforschung, FVOL ca. 10 Mio. Euro/J (SOLL)
 - BMU - Arbeitsgruppe Optionenvergleich (Sondervertrag, keine Projektförderung)
 - BMBF – Ablagerung unter Tage, FVOL ca. 2 Mio Euro/J (auslaufend bis 2011)
- Perspektive
 - Projektstatusgespräche „Nukleare Sicherheitsforschung“ ab 2011
 - PT „Nukleare Sicherheitsforschung“ am KIT bündelt alle nuklear ausgerichteten Projektförderaktivitäten des Bundes
- Herausforderungen
 - Personal
 - Erfolg bei Ausschreibungen zu PT-Aufgaben

PTKA-WTE – Projektbereich Entsorgung

- Administration
 - Frau V. Horak (Lt. WTE-DD, BMBF-715)
 - Frau E. Ernst (BMBF-724)
 - Frau E. Förster (WTE-DD, BMBF, BMWi)
 - Frau K. Geyer (BMBF, BMWi)
 - Frau S. Martin (BMWIIIIB3, BMBF-713, BMBF-715)
 - Herr W. Chroscicki (BMBF-715, BMWIIIIB3)

- Projektbevollmächtigte
 - Fr. Dipl.-Ing. S. Gräber (WTE-DD, BMBF-715, BMBF-724)
 - Dr. H. Bittdorf (BMWIIIIB3)
 - Dr. W. Steininger (BMWIIIIB3)
 - Dipl.-Ing. Bühler (BMBF-724, BMWIIIIB3, BMU)
 - Dr. M. Weigl (BMBF-713, BMBF-715)
 - Fr. Dr. S. Stumpf (BMBF-715, BMWIIIIB3, BMU)
 - N.N. (BMBF-715, Besetzung vorauss. zum 1. 8. 2010)

- Leitung
 - Frau S. Proboscht (Lt. Admin PTKA-WTE, HHB)
 - Dr. M. Kautt (PTKA-WTE)
 - Dr. H. Pitterich (WTE-E / Projektbereich Entsorgung)

... viele weitere Kolleginnen und Kollegen bei PTKA-WTE, die uns unterstützen ...

... darauf einen kühlen Schluck!

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit

Thermohaline Strömungen in geklüftet- porösen Medien

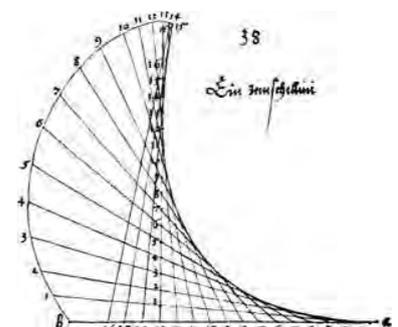
P. Frolkovic, J. Geiser, A. Grillo, K. Johannsen, M. Lampe,
D. Logaschenko, S. Stichel, G. Wittum

in cooperation with

S. Attinger, E. Fein, J. Flügge, A. Fuchs, W. Kinzelbach,
J. Mönig, F. Radu, A. Rübel, A. Schneider, R. Stork



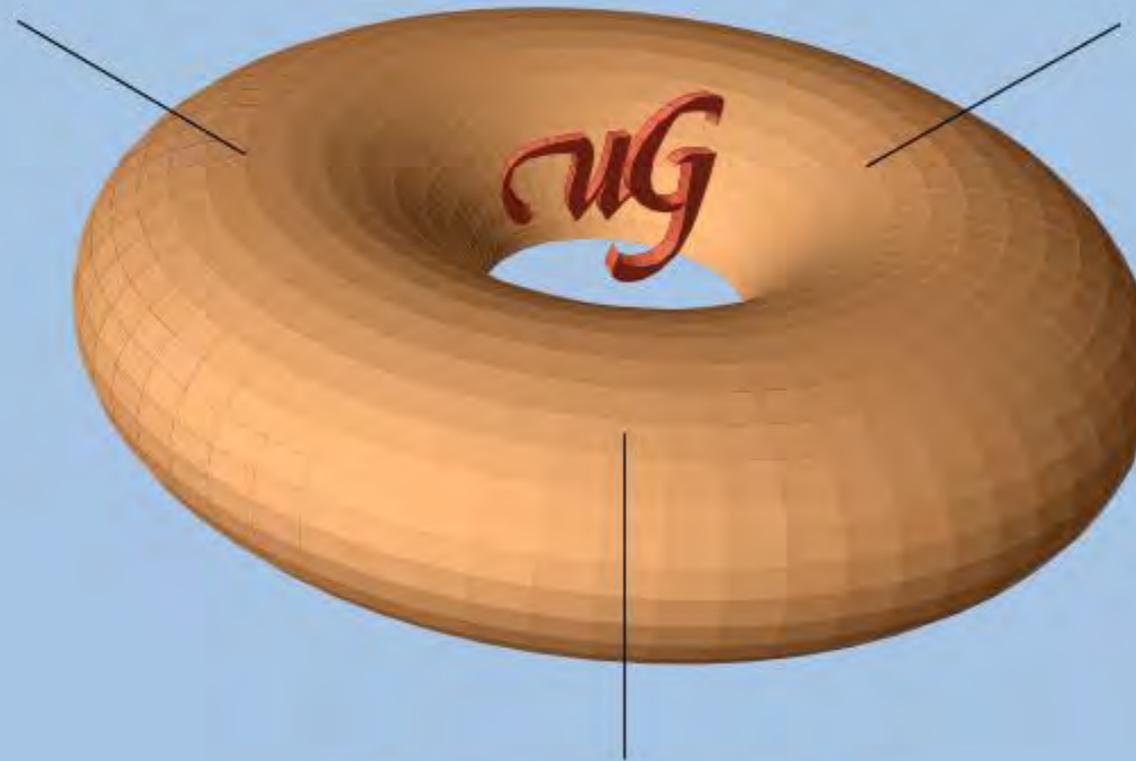
Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



SIMULATION SYSTEM *UG*

ADAPTIVITY

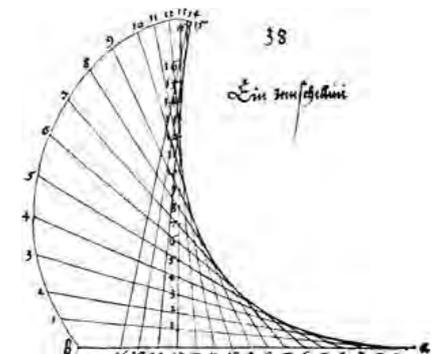
MULTIGRID



PARALLELISM



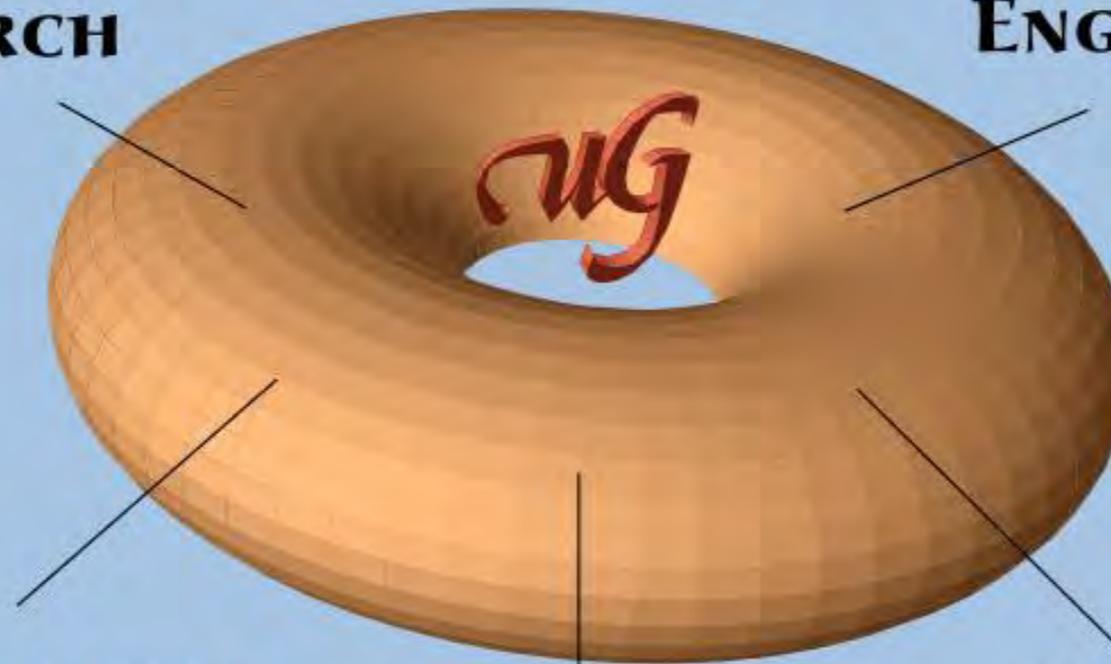
Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



SIMULATION SYSTEM *UG*

**ENVIRONMENTAL
RESEARCH**

**CHEMICAL
ENGINEERING**



**COMPUTATIONAL
BIOLOGY**

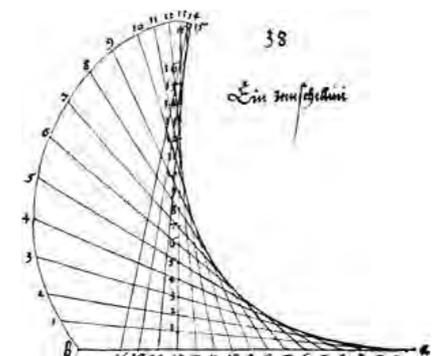
**MEDICAL
ENGINEERING**

**FINANCIAL
ENGINEERING**

- Multiscale Modeling \leftrightarrow Numerics



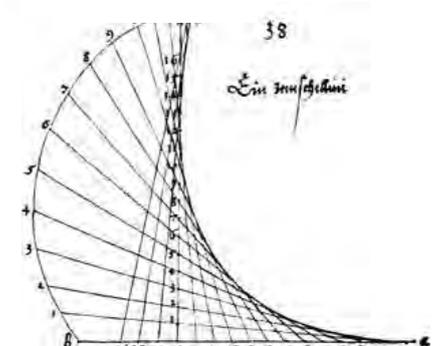
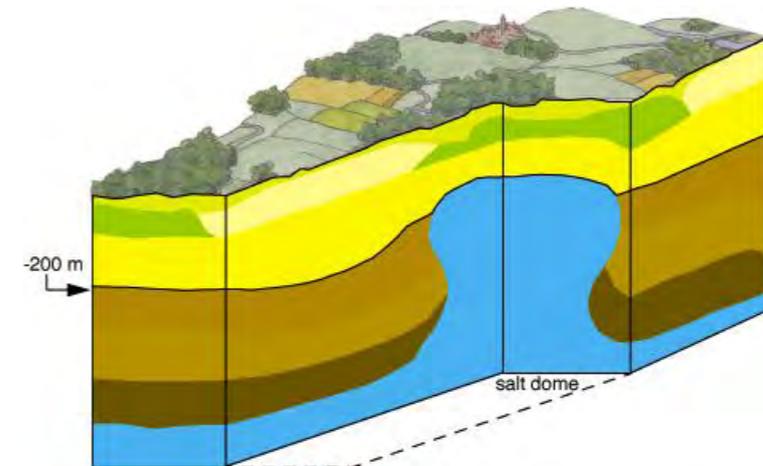
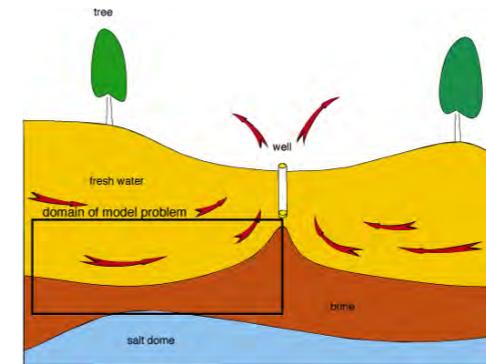
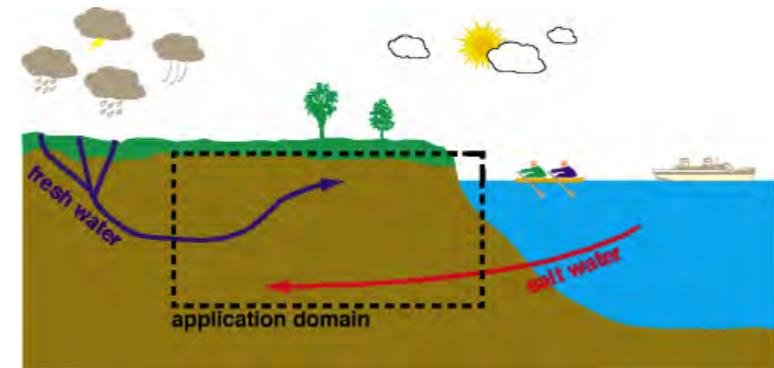
Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Distributed Density Driven Flow

D³F

- Saltwater intrusion
- Upconing
- Flow around salt domes



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

D³F

- Distributed Density Driven Flow
- Solver for

$$\frac{\partial(n\rho(c))}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(c)\vec{v}) = Q_p(c),$$

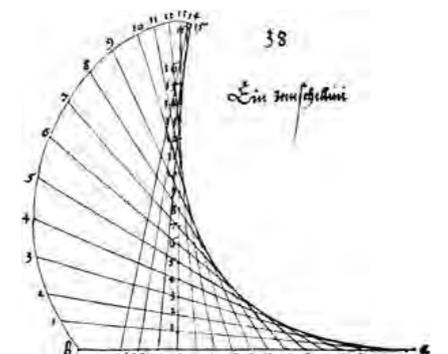
$$\frac{\partial(n\rho(c)c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(c)(c\vec{v} - D\nabla c)) = Q_c(c)$$

+ b.c.; with

$$\vec{v} = -K/\mu(c)(\nabla p - \rho(c)\vec{g}),$$

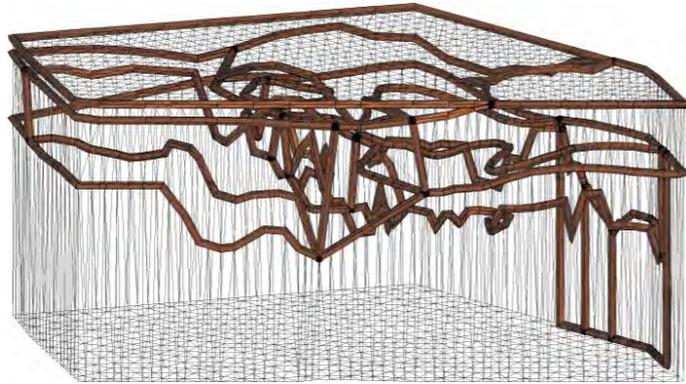


Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

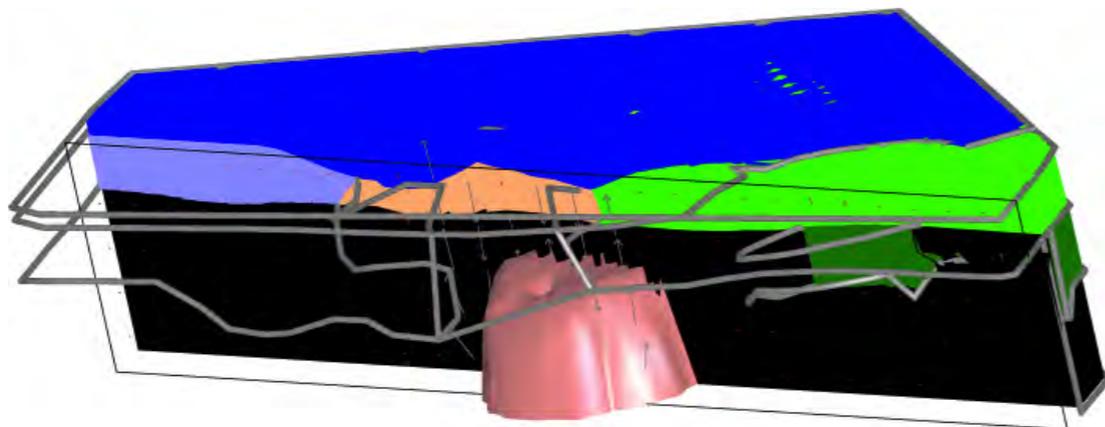


D³F

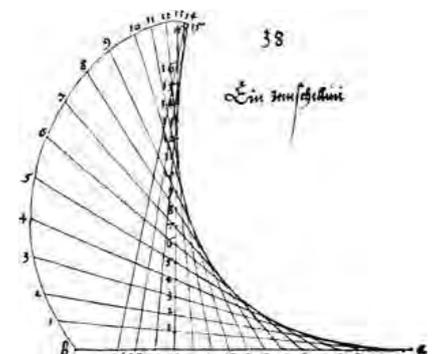
- complicated domains w. unstructured grids (\approx)



Zur Anzeige wird der QuickTime™
Dekompressor „YUV420 codec“
benötigt.

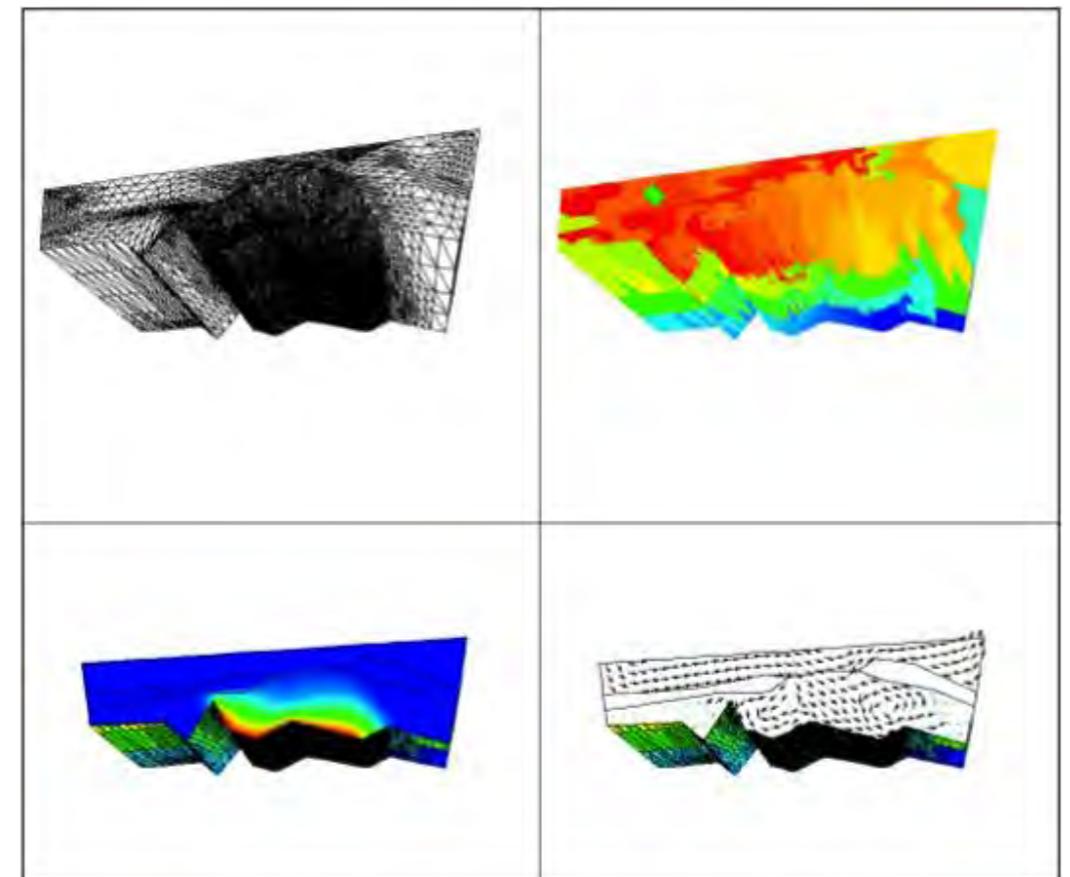
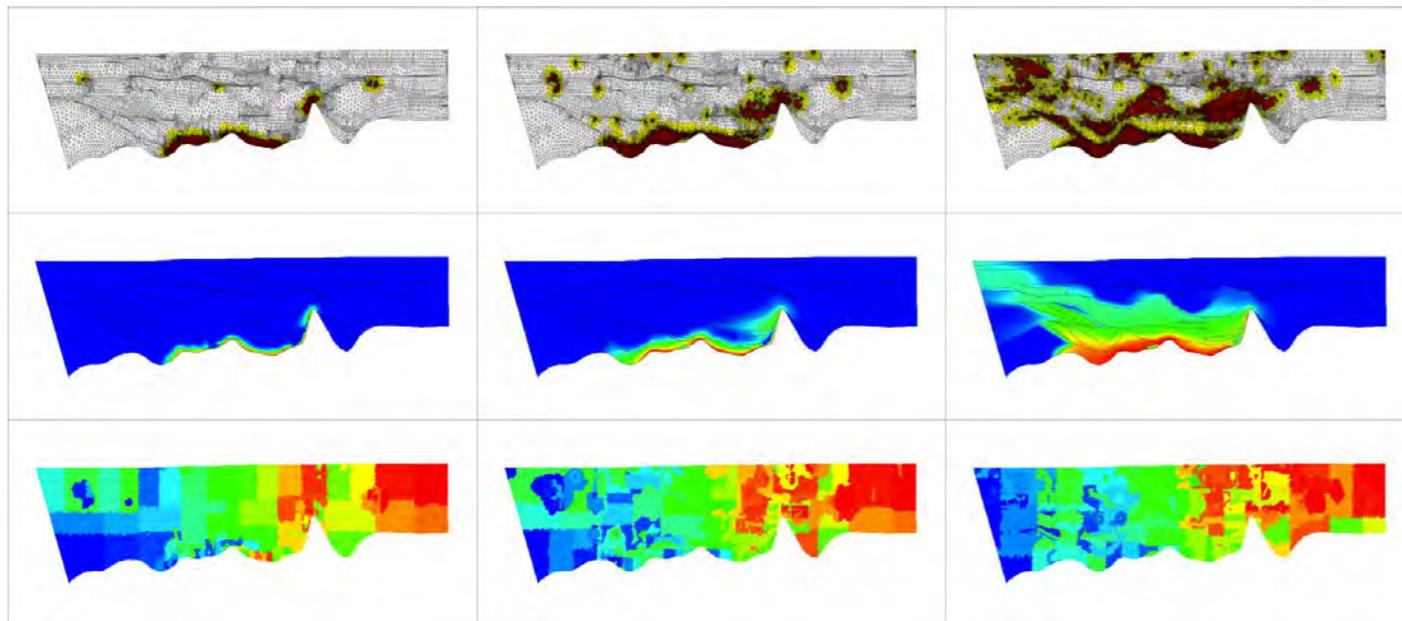


Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

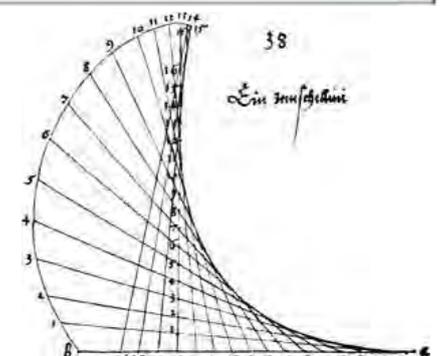


D³F

- Full density dependent non-linear dispersion
- fully parallel and adaptive



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



D³F Parallel Efficiency

- Uniform refinement
- weak scaling
- Adaptive refinement
- weak scaling

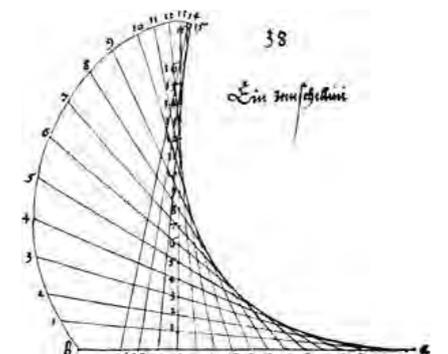
P	h	UKN	NIT[#]	TIT[s]	S _S [#]	E _S
1	1/8	147.074	19	37.31	1	1.0
8	1/16	1.082.498	23	45.83	5.4	0.67
64	1/32	8.414.978	35	54.12	24	0.37
512	1/64	66.602.498	22	58.54	282	0.55

h	UKN	TNLS[s]	TADAPT[s]	TLB[s]	TMIG[s]
1/16	21.016	52.3	1.93	0.97	3.57
1/32	102.280	224.	13.2	3.99	13.2
1/32	433.908	657.	44.6	11.2	41.8
1/64	1.750.708	2708.	160.	27.9	108.

- Lang, S., Wittum, G.: Large scale density driven flow simulations using parallel unstructured grid adaptation and local multigrid methods. Concurrency Computat., 17, 11, 1415 - 1440, Oct. 2005.



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



R³T

- RRRT: Package solving systems of up to 160 coupled convection-diffusion reaction equations

RRRT: Radionuclides

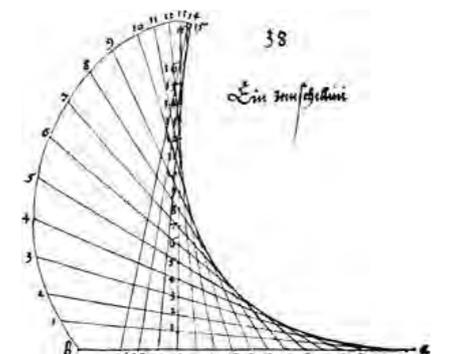
RRRT: Reactions

RRRT: Retardation

RRRT: Transport



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

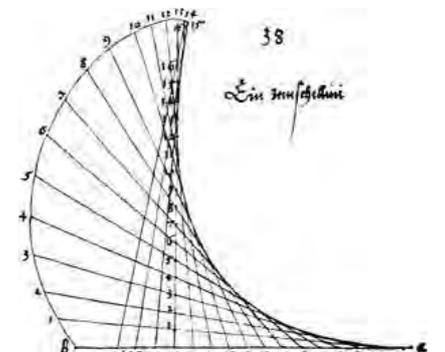


Validation

- Extensive validation
- Especially designed experiments (saltpool)
- Johannsen, K., Kinzelbach, W., Oswald, S., Wittum, G.: The saltpool benchmark problem - numerical simulation of saltwater upconing in a porous medium, *Advances in Water Resources*, 25 (3) (2002) pp. 335-348.
- Field cases measured (Cape Cod, E. Fein)



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

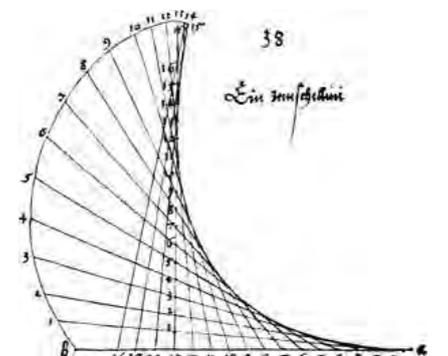


New Work

- Thermohaline flows
- fractured media



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Thermohaline Flows

- Solving

$$\phi_f \frac{\partial \hat{\rho}_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\hat{\rho}_f \mathbf{q}_f) = 0,$$

$$\phi_f \frac{\partial (\hat{\rho}_f \omega_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\hat{\rho}_f \omega_s \mathbf{q}_f + \mathbf{J}_d) = 0,$$

$$\phi_f \hat{\rho}_f \Theta \frac{D_f \hat{S}_f}{Dt} + (1 - \phi_f) \rho_r \Theta \frac{\partial \hat{S}_r}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{J}_T - \hat{\mu}_{sw} \mathbf{J}_d) = 0,$$

with

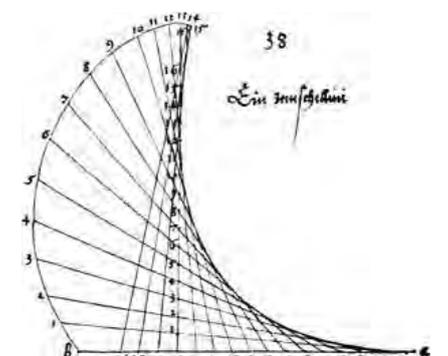
$$\mathbf{q}_f = -\frac{k}{\nu_f} (\nabla p - \rho_f \mathbf{g}) \quad (\text{Onsager})$$

$$\mathbf{J}_d = -\phi_f \rho_f D \nabla \omega_s - \phi_f \rho_f D \frac{k_p}{p} \nabla p - \phi_f \rho_f D S \omega_s (1 - \omega_s) \nabla \Theta,$$

$$\mathbf{J}_T = -\phi_f \rho_f D Q \nabla \omega_s - \phi_f \rho_f D Q \frac{k_p}{p} \nabla p - \left[L_{TT} - \phi_f \rho_f \frac{D Q h_{sw}}{\Theta \frac{\partial \hat{\rho}_{sw}}{\partial \omega_s}} \right] \nabla \Theta,$$



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Thermohaline Flows

Solving

$$\phi_f \frac{\partial \hat{\rho}_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\hat{\rho}_f \mathbf{q}_f) = 0,$$

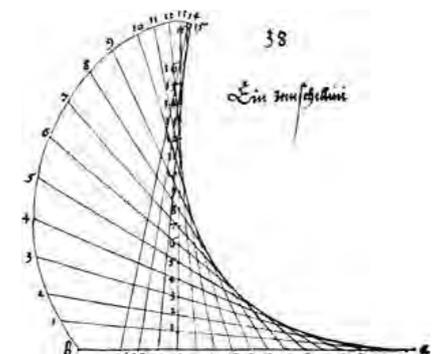
$$\phi_f \frac{\partial (\hat{\rho}_f \omega_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\hat{\rho}_f \omega_s \mathbf{q}_f + \mathbf{J}_d) = 0,$$

$$\phi_f \hat{\rho}_f \Theta \frac{D_f \hat{S}_f}{Dt} + (1 - \phi_f) \rho_r \Theta \frac{\partial \hat{S}_r}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{J}_T - \hat{\mu}_{sw} \mathbf{J}_d) = 0,$$

- Alfio Grillo, Michael Lampe, Gabriel Wittum: Modelling and Simulation of temperature-density-driven flow and thermodiffusion in porous media. Journal of Porous Media, 2010 to appear.



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

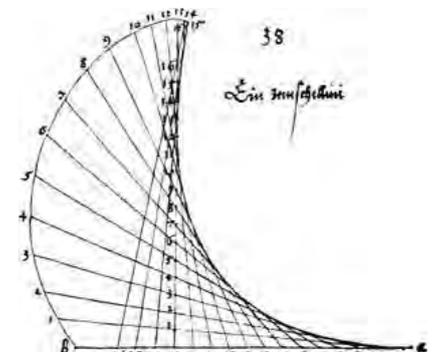


Thermohaline Flows

- opposite effects of temperature and salt concentration
- Temperature \uparrow
- salt water \downarrow
- connection of mass flux with temperature gradient (Soret effect)
- connection of heat flux with concentration gradient (Dufour effect)



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

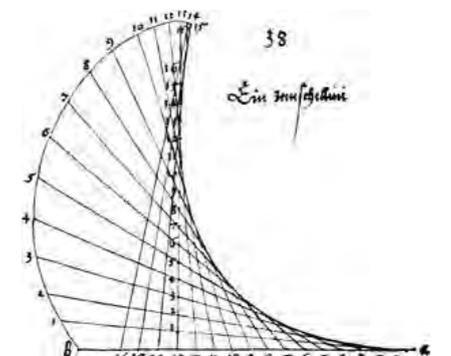


Example

- Moving parcel, benchmark problem from Oldenburg, Pruess, 1999 (2d)



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Thermohaline Flows

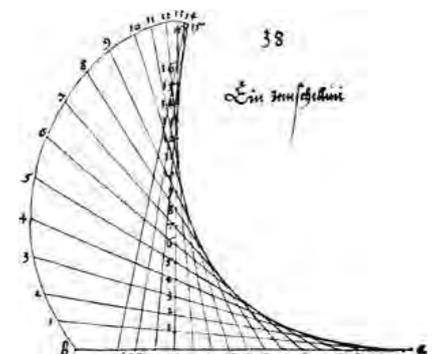
- negative buoyancy

Zur Anzeige wird der QuickTime™
Dekompressor „PNG“
benötigt.

Zur Anzeige wird der QuickTime™
Dekompressor „PNG“
benötigt.



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Thermohaline Flows

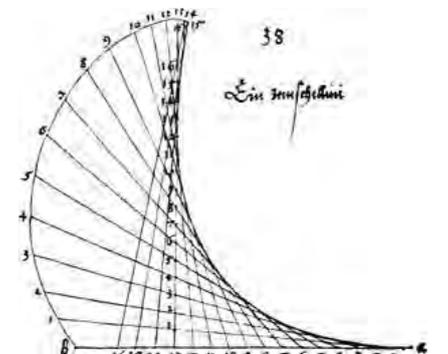
- positive buoyancy

Zur Anzeige wird der QuickTime™
Dekompressor „PNG“
benötigt.

Zur Anzeige wird der QuickTime™
Dekompressor „PNG“
benötigt.



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

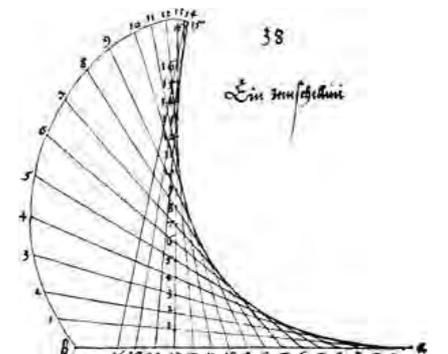


Fractured Media

- Low dimensional formulation
- Multiphase flow
- R. Helmig; O. Kolditz; V. Reichenberger; ...
- Multiscale modeling and numerics: Dynamic coupling between micro and macroscales

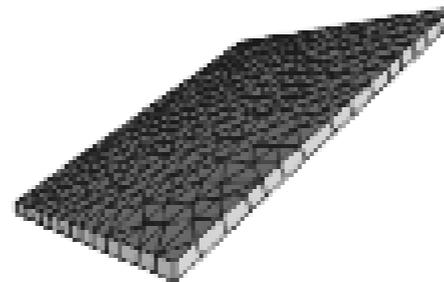
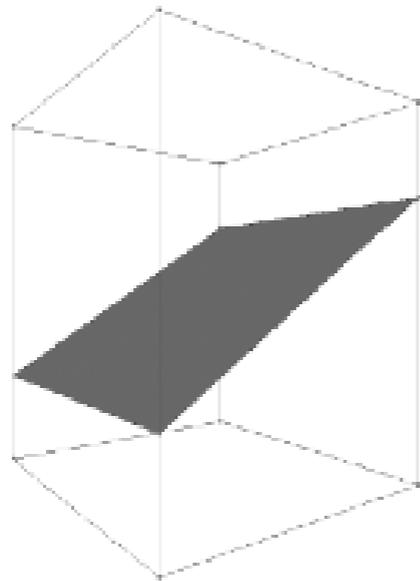


Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Flow in Fractured Media

- low dimensional \leftrightarrow full dimensional

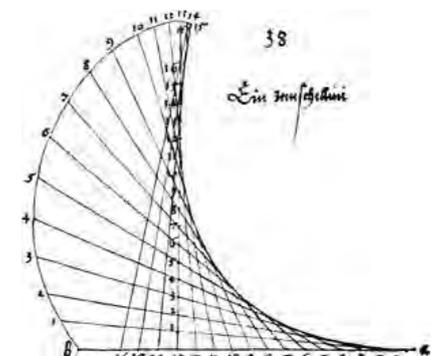


Representation of fractures:

1. Polyhedral faces + pointwise thickness
2. expand to volume

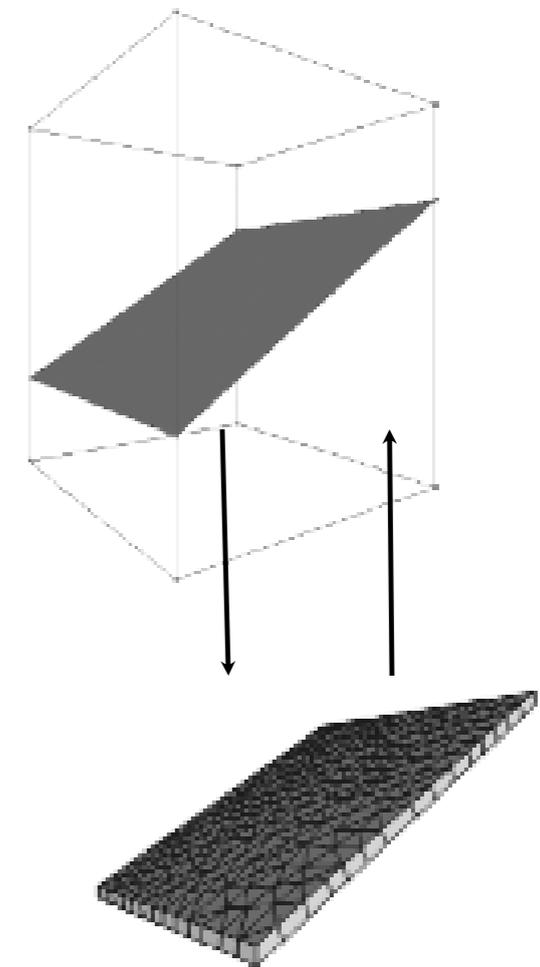


Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

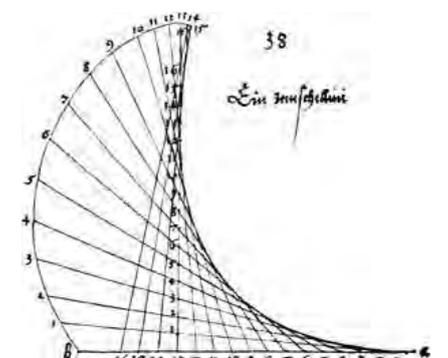


Flow in Fractured Media

- Problem: Multigrid refinement
- coarse grid: low dimensional
- fine grid: full dimensional

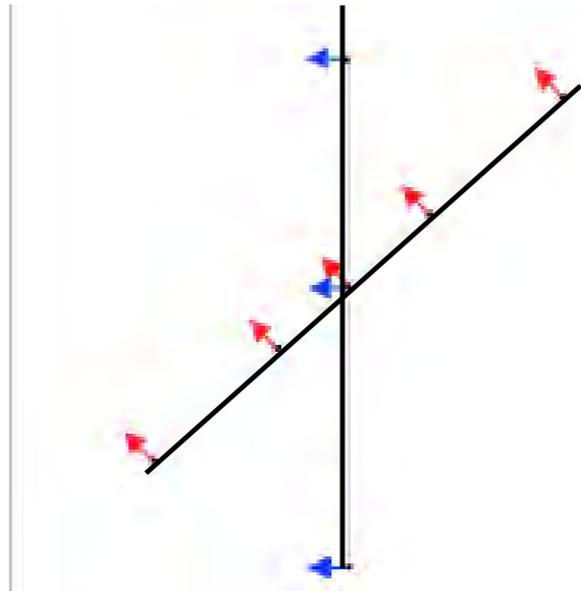


Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

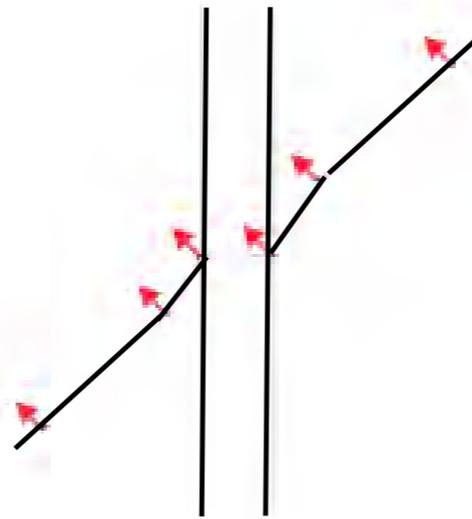


Flow in Fractured Media

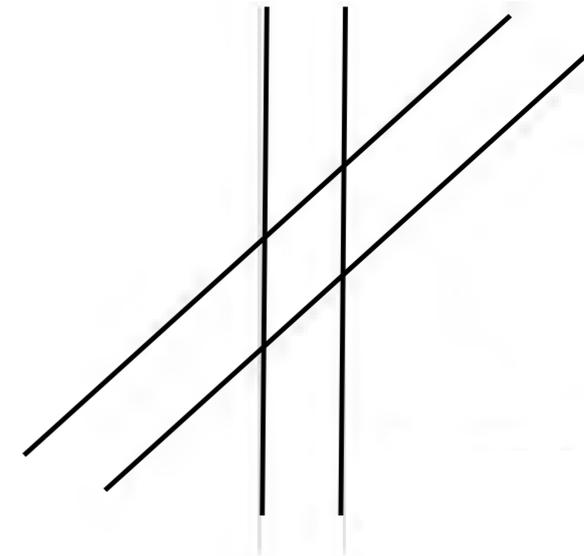
- Geometry



initial rep



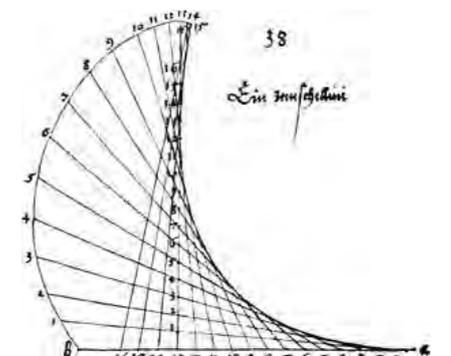
expansion



correction

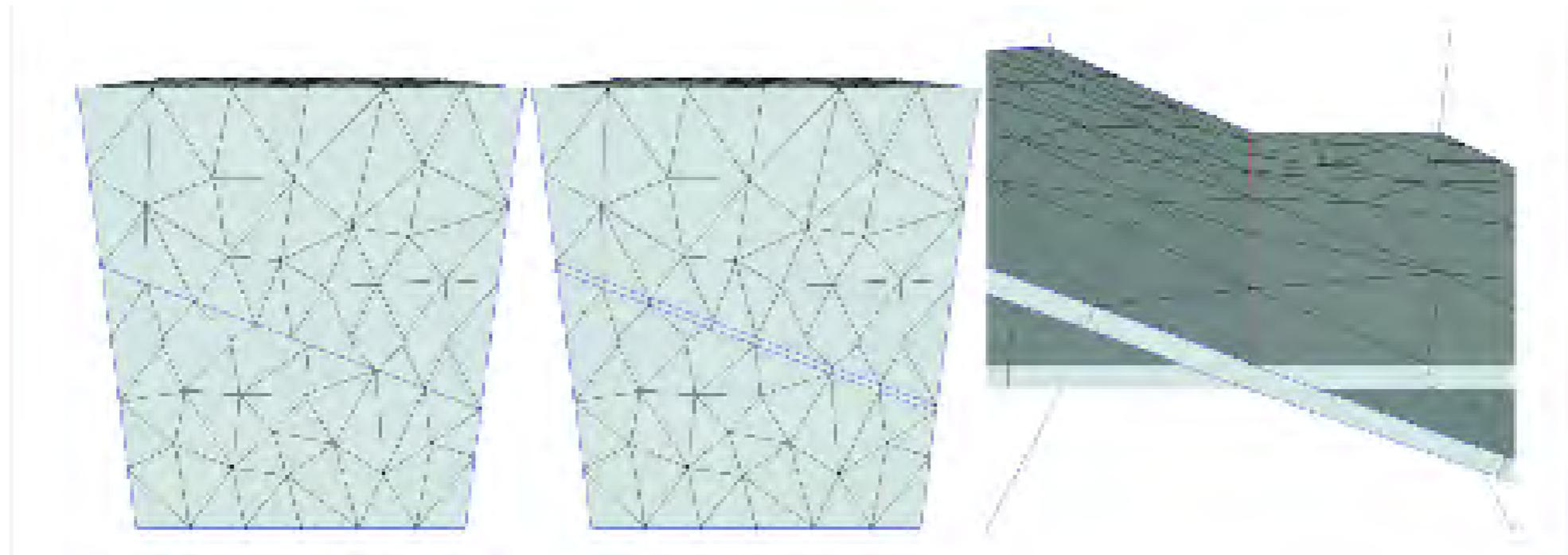


Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Flow in Fractured Media

- Grid follows the anisotropic direction rectangularly

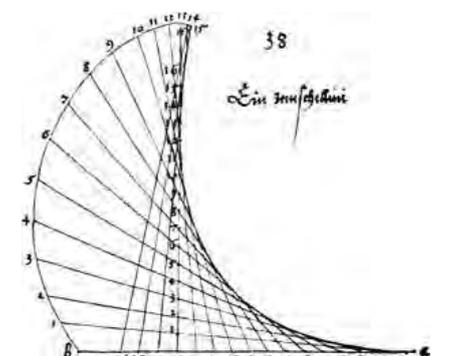


successful treatment of anisotropy possible: ARTE

Fuchs, W., 2003



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Low Dimensional Model

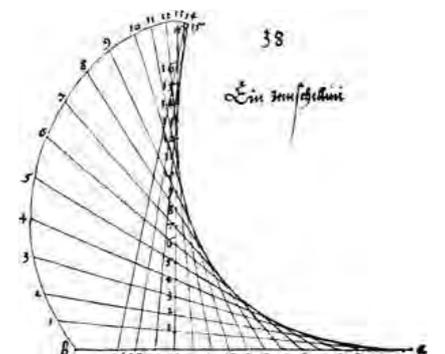
- Density driven flow model
- average across fracture

$$\langle F \rangle(t, x, y) := \frac{1}{\epsilon} \int_{-\epsilon/2}^{\epsilon/2} F(t, x, y, z) dz.$$

+transmission conditions



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Transmission Conditions

- Full dimensional:
- Continuity of normal fluxes of fluid and brine

$$-\rho(c_f) \frac{K_f}{\mu} \left(\frac{\partial p_f}{\partial n} - \rho(c_f) g_n \right) = -\rho(c_m) \frac{K_m}{\mu} \left(\frac{\partial p_m}{\partial n} - \rho(c_m) g_n \right)$$

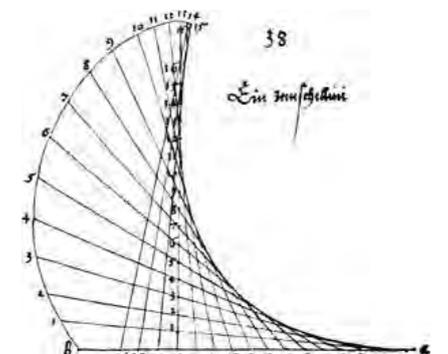
$$-D_f \left(1 - \frac{\rho'}{\rho^w} c_f \right) \frac{\partial c_f}{\partial n} = -D_m \left(1 - \frac{\rho'}{\rho^w} c_m \right) \frac{\partial c_m}{\partial n}$$

Continuity of pressure and concentration

$$p_f = p_m, \quad \text{and} \quad c_f = c_m$$



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Transmission Conditions

- Low dimensional
- the auxiliary vector fields

$$\mathbf{Q}_\alpha := \rho^{PW} \mathbf{q}_\alpha - \rho' \mathbf{J}_\alpha, \quad \text{and} \quad \mathbf{P}_\alpha := c_\alpha \mathbf{q}_\alpha + \mathbf{J}_\alpha;$$

with

$$\mathbf{q}_\alpha = -\frac{\mathbf{K}_\alpha}{\mu} [\nabla p_\alpha - \rho_\alpha(c_\alpha) \mathbf{g}], \quad \rho' = \frac{\rho^{PB} - \rho^{PW}}{\rho^{PB}}$$

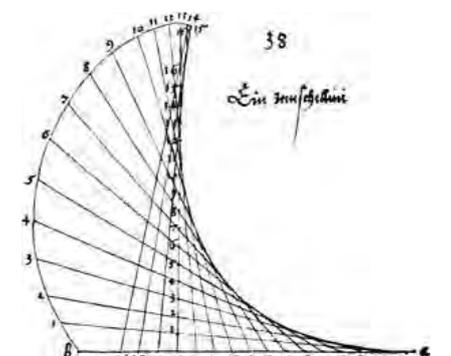
$$\mathbf{J}_\alpha = -\left(\frac{\rho^{PW}}{\rho^{PW} + \rho' c_\alpha} \mathbf{D}_\alpha \right) \nabla c_\alpha.$$

are continuous across the fracture interfaces

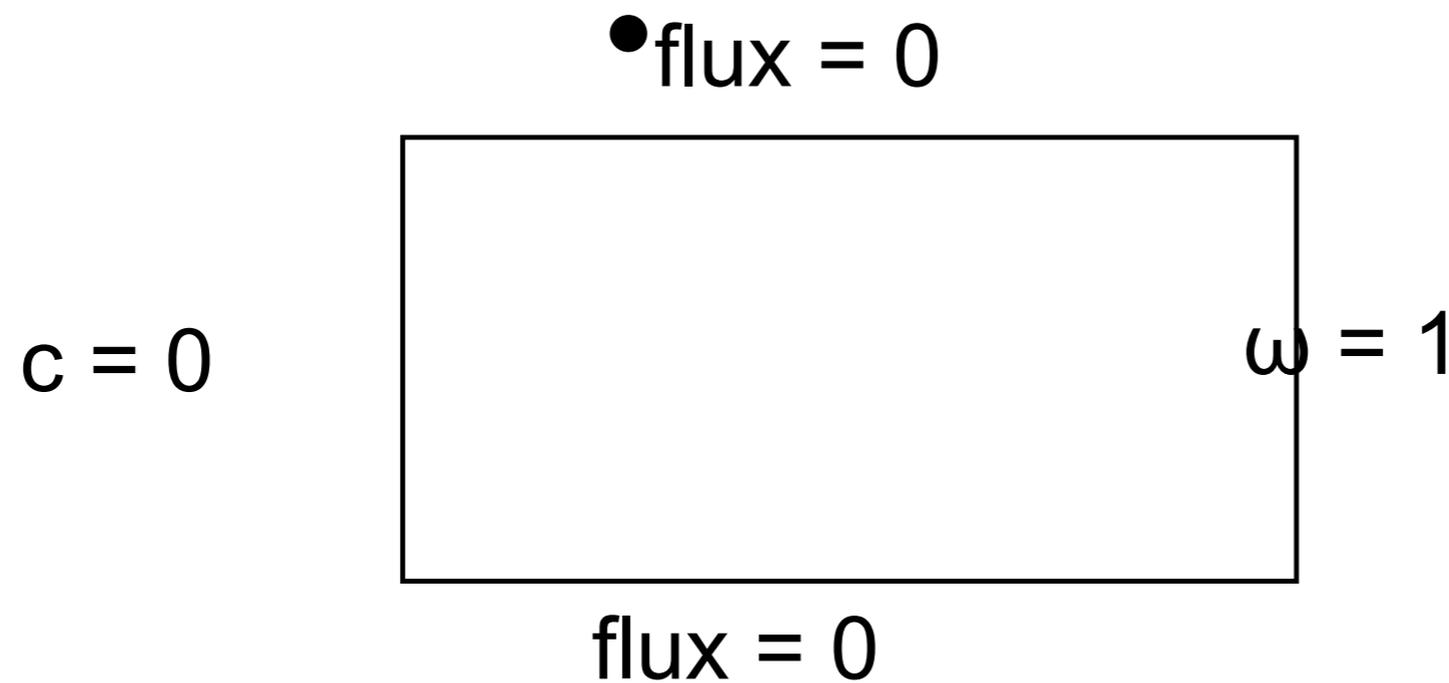
$$Q_{fn}^{(k)} = Q_{mn}^{(k)}, \quad \text{and} \quad P_{fn}^{(k)} = P_{mn}^{(k)}$$



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



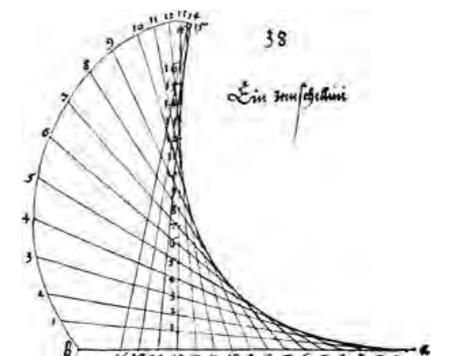
Henry's Problem (2d)



hydrostatic pressure



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



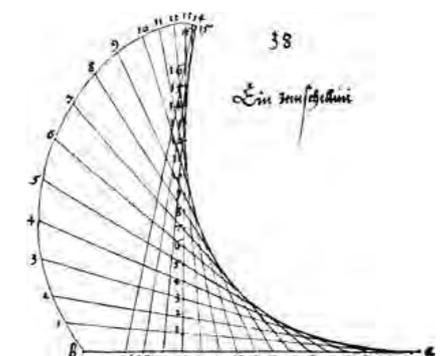
Henry's Problem

- Parameters

Symbol	Quantity	Value	Unit
D_d	Diffusion coefficient	$18.8571 \cdot 10^{-6}$	$[m^2 s^{-1}]$
$D_m = \phi_m D_d$	Diffusion coefficient in the medium	$6.6 \cdot 10^{-6}$	$[m^2 s^{-1}]$
$D_f = \phi_f D_d$	Diffusion coefficient in the fracture	$13.2 \cdot 10^{-6}$	$[m^2 s^{-1}]$
g	Gravity	9.81	$[m s^{-2}]$
K_m	Permeability of the medium	$1.019368 \cdot 10^{-9}$	$[m^2]$
K_f	Permeability of the fracture	$1.019368 \cdot 10^{-5}$	$[m^2]$
ϕ_m	Porosity of the medium	0.35	-
ϕ_f	Porosity of the fracture	0.7	-
μ	Viscosity	10^{-3}	$[kg m^{-1} s^{-1}]$
ρ_w	Density of water	$1 \cdot 10^3$	$[kg m^{-3}]$
ρ_s	Density of brine	$1.025 \cdot 10^3$	$[kg m^{-3}]$
a_{α}^t	Transversal dispersivity length	0	$[m]$
a_{α}^l	Longitudinal dispersivity length	0	$[m]$

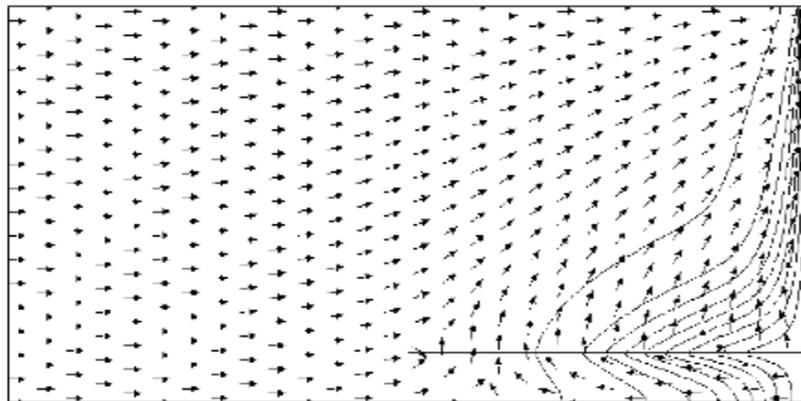


Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

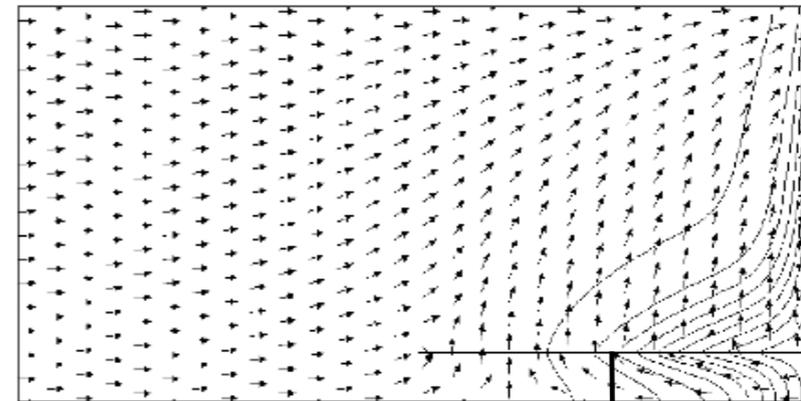


Henry-Problem w. Fracture

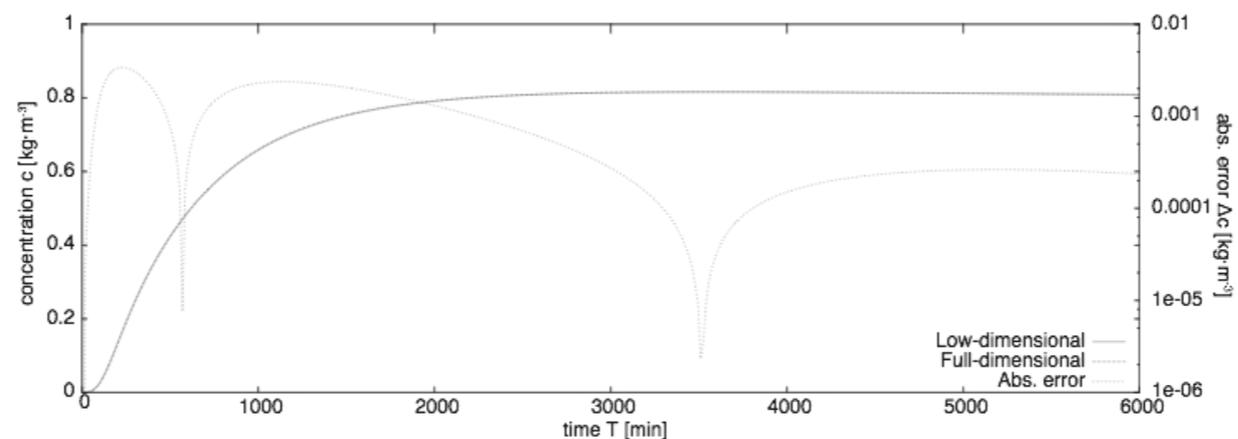
$$\varepsilon = 3 \text{ mm}, T = 5\text{h}$$



full dim. rep.



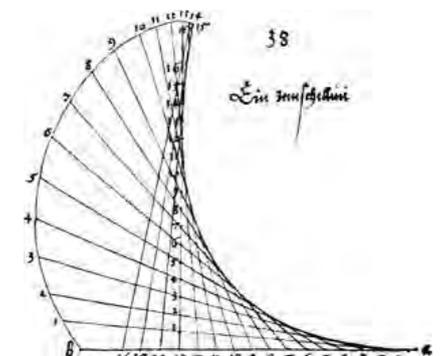
low dim. rep.



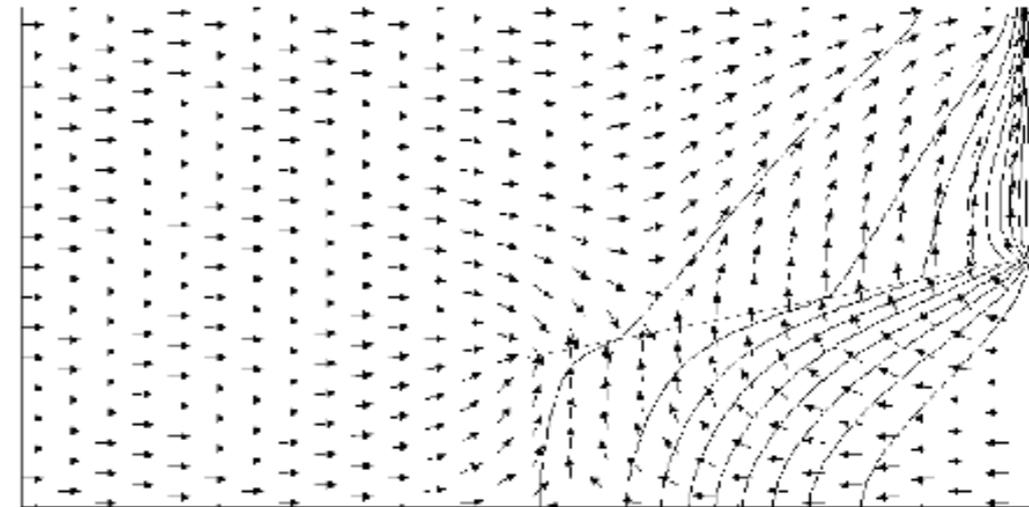
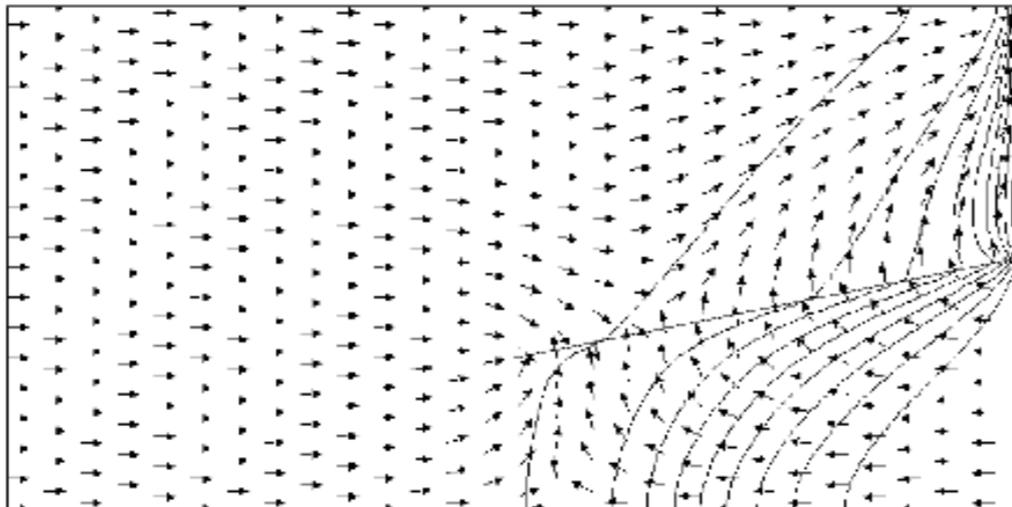
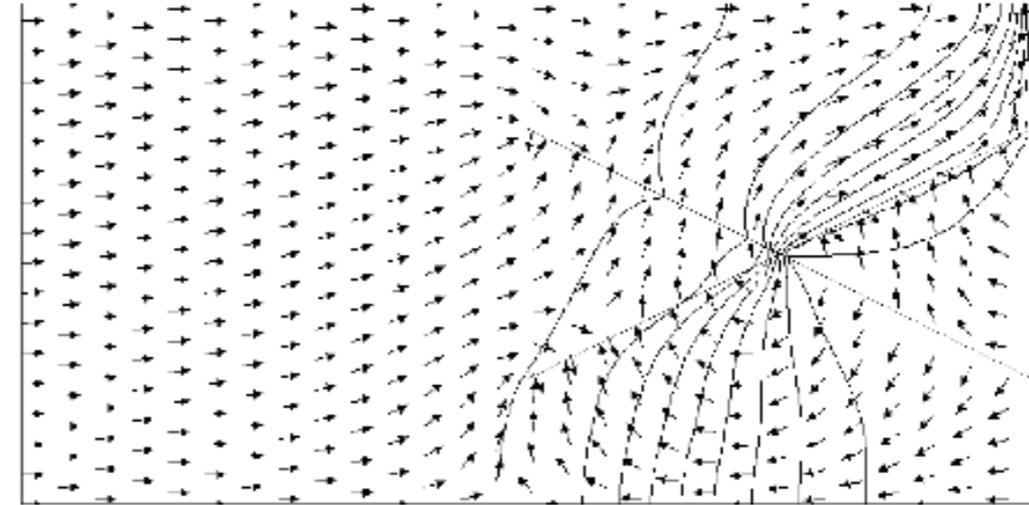
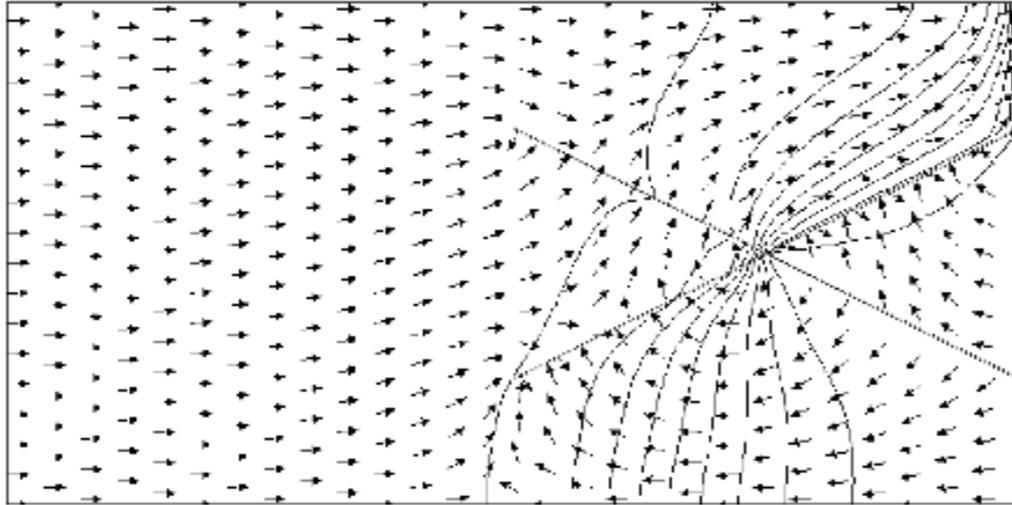
$x = 1.5 \text{ m}$



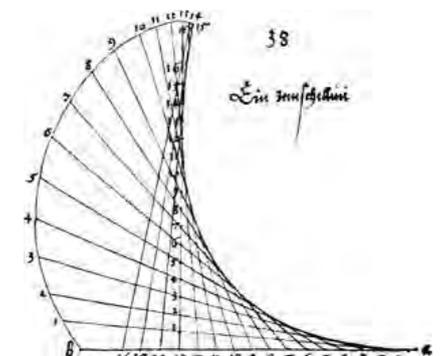
Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



Henry-Problem w. Fracture

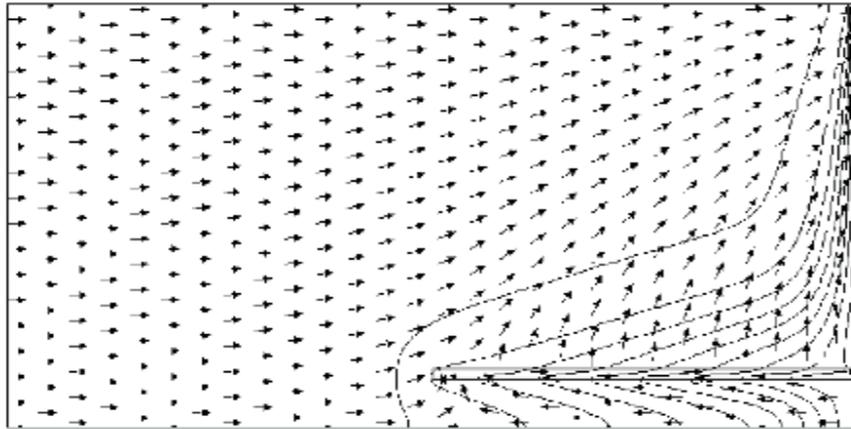


Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

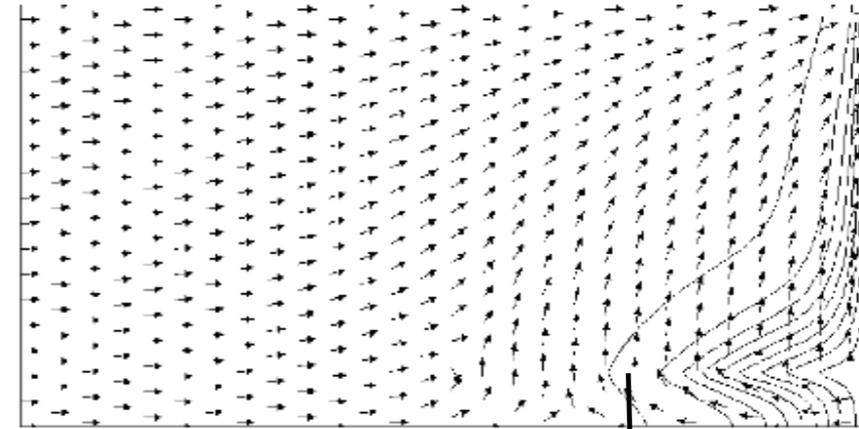


Henry-Problem w. Fracture

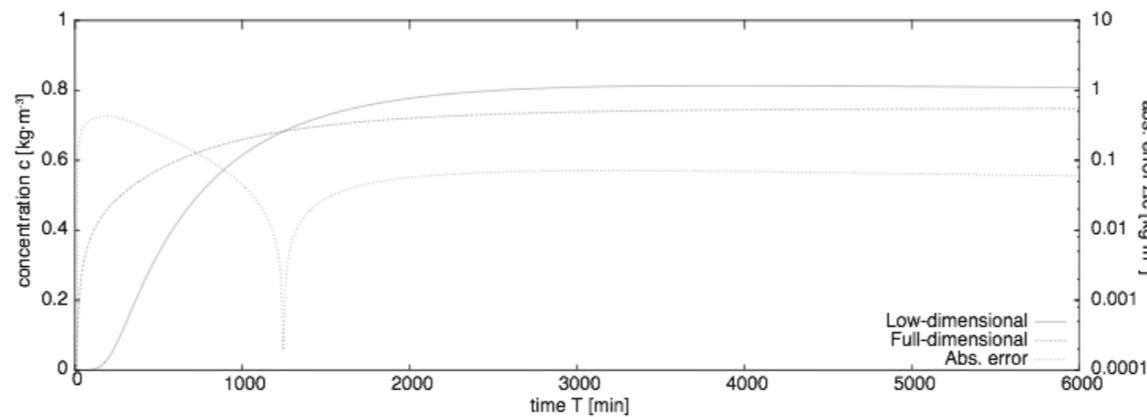
$$\varepsilon = 24 \text{ mm}, T = 5\text{h}$$



full dim. rep.



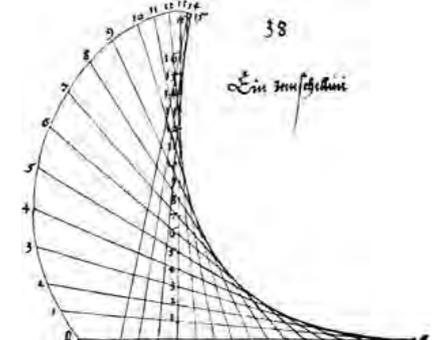
low dim. rep.



$x = 1.5\text{m}$

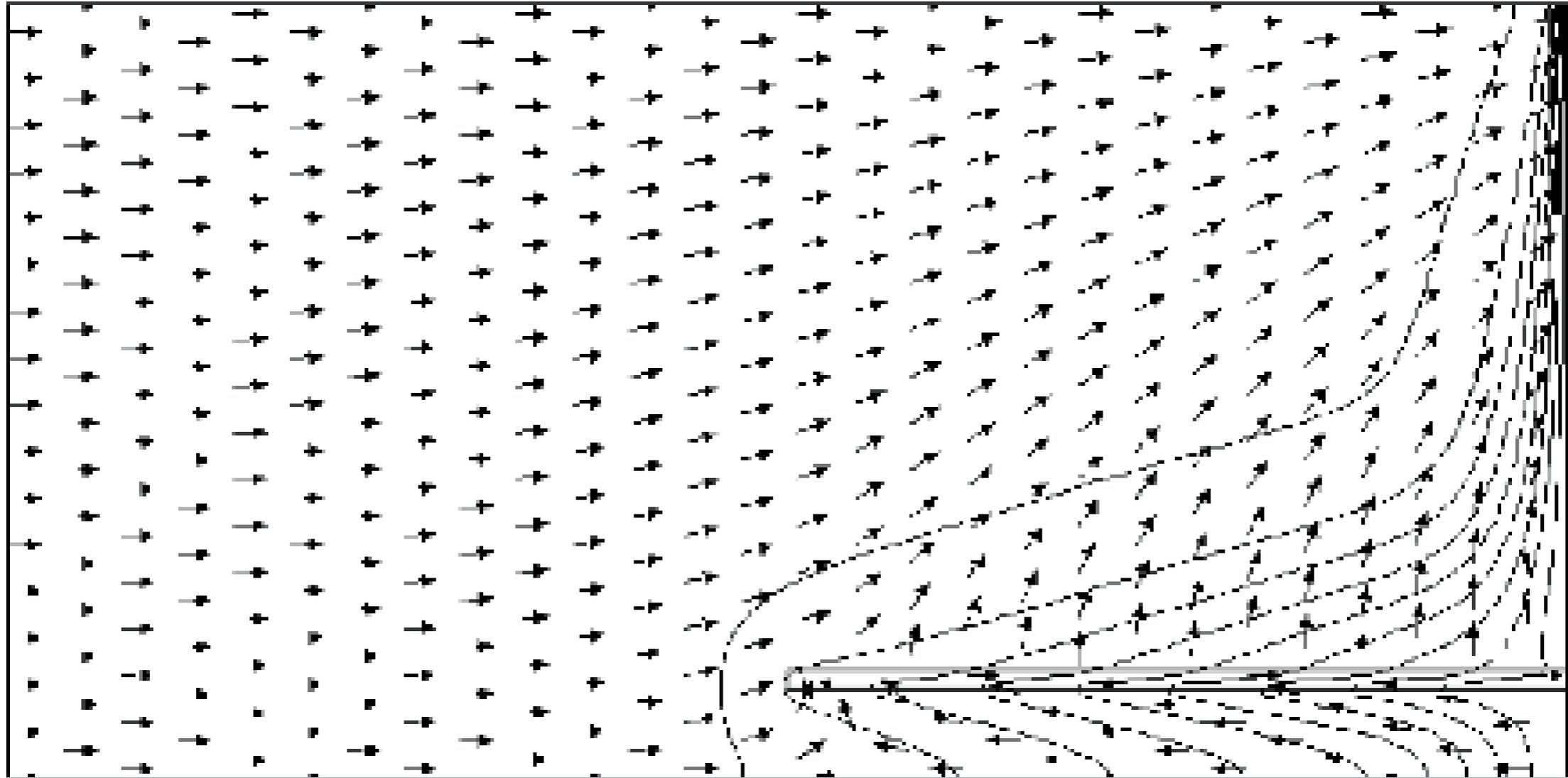


Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

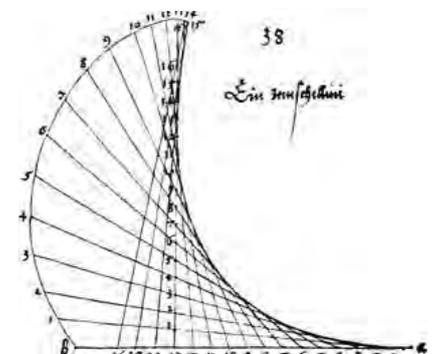


Henry-Problem w. Fracture

$$\varepsilon = 24 \text{ mm}, T = 5h$$



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt

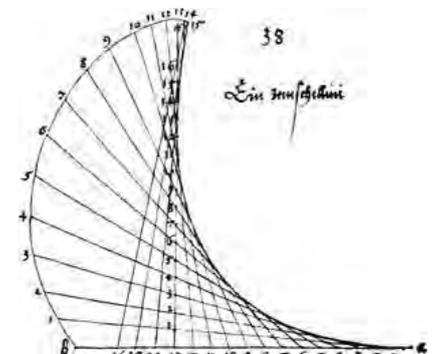


Henry-Problem w. Fracture

- Low dimensional representation works fine for thin fractures.
- For larger fractures (24 mm!) vortices may exist in the fracture changing the flow considerably



Gabriel Wittum
G-CSC
University of Frankfurt



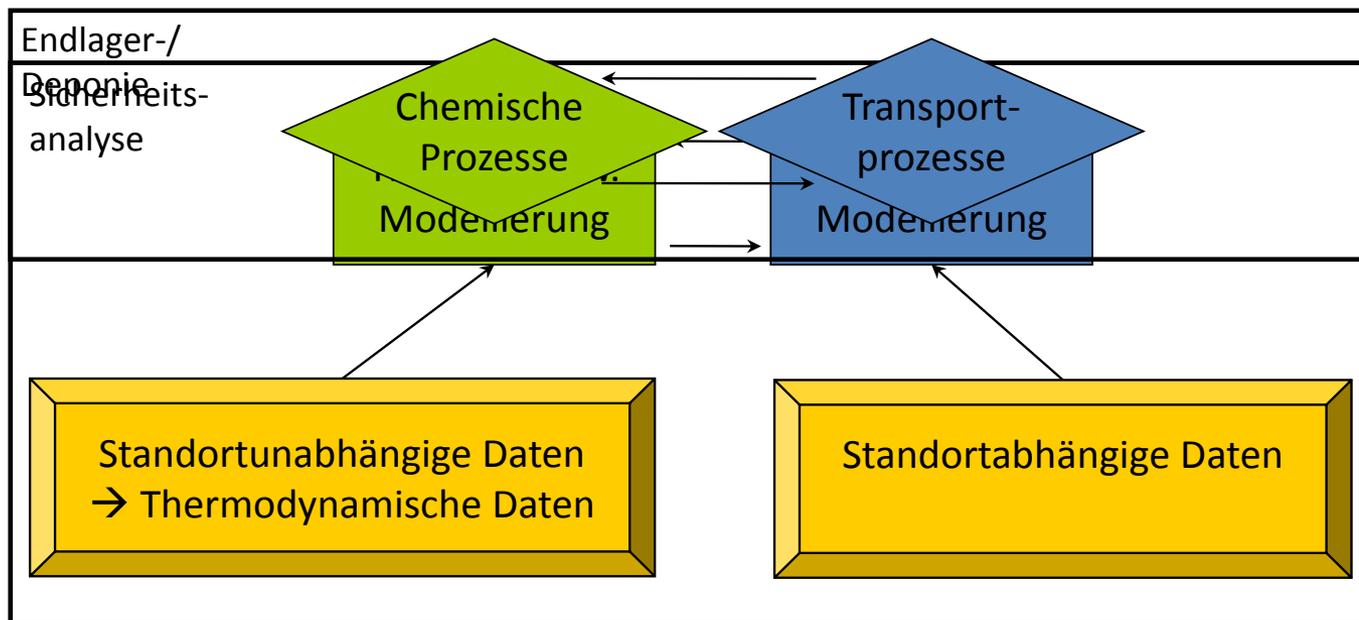
THEREDA

Verbundprojekt THEREDA

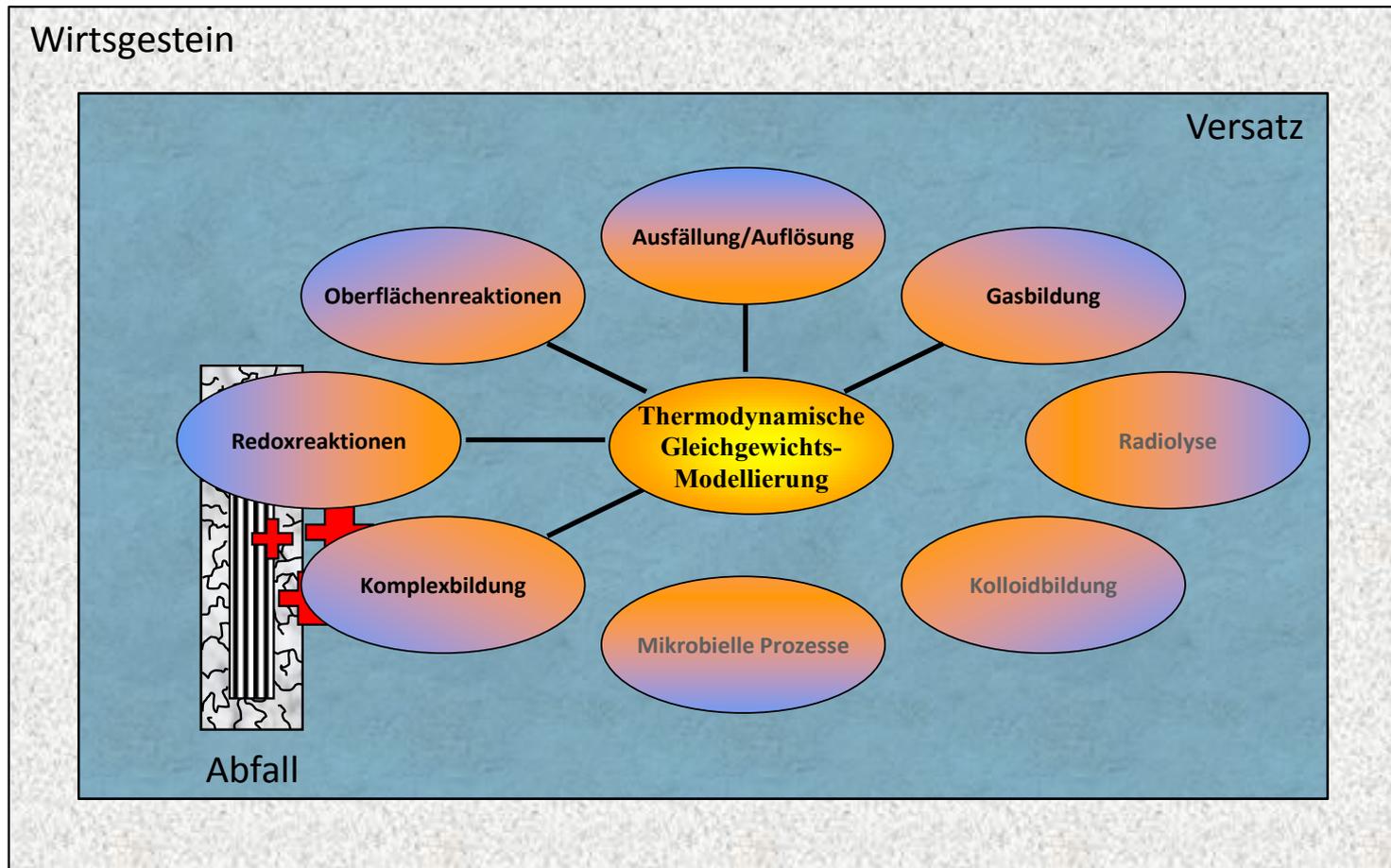
Entwicklung einer thermodynamischen
Referenzdatenbasis zur Beschreibung von
geochemischen Prozessen in Untertagedeponien und
Endlagern für radioaktive Abfälle

Helge C. Moog

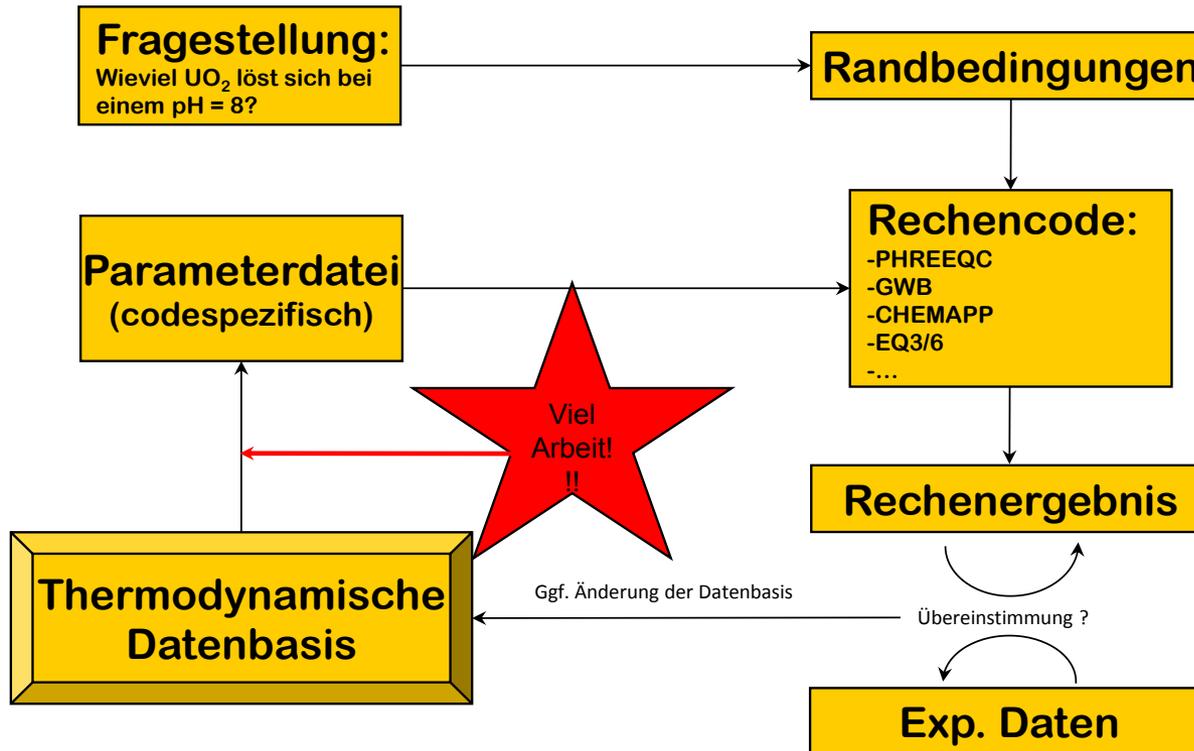
Wofür brauchen wir thermodynamische Gleichgewichtsmodellierung?



Was verstehen wir unter „chemischen Prozessen“?

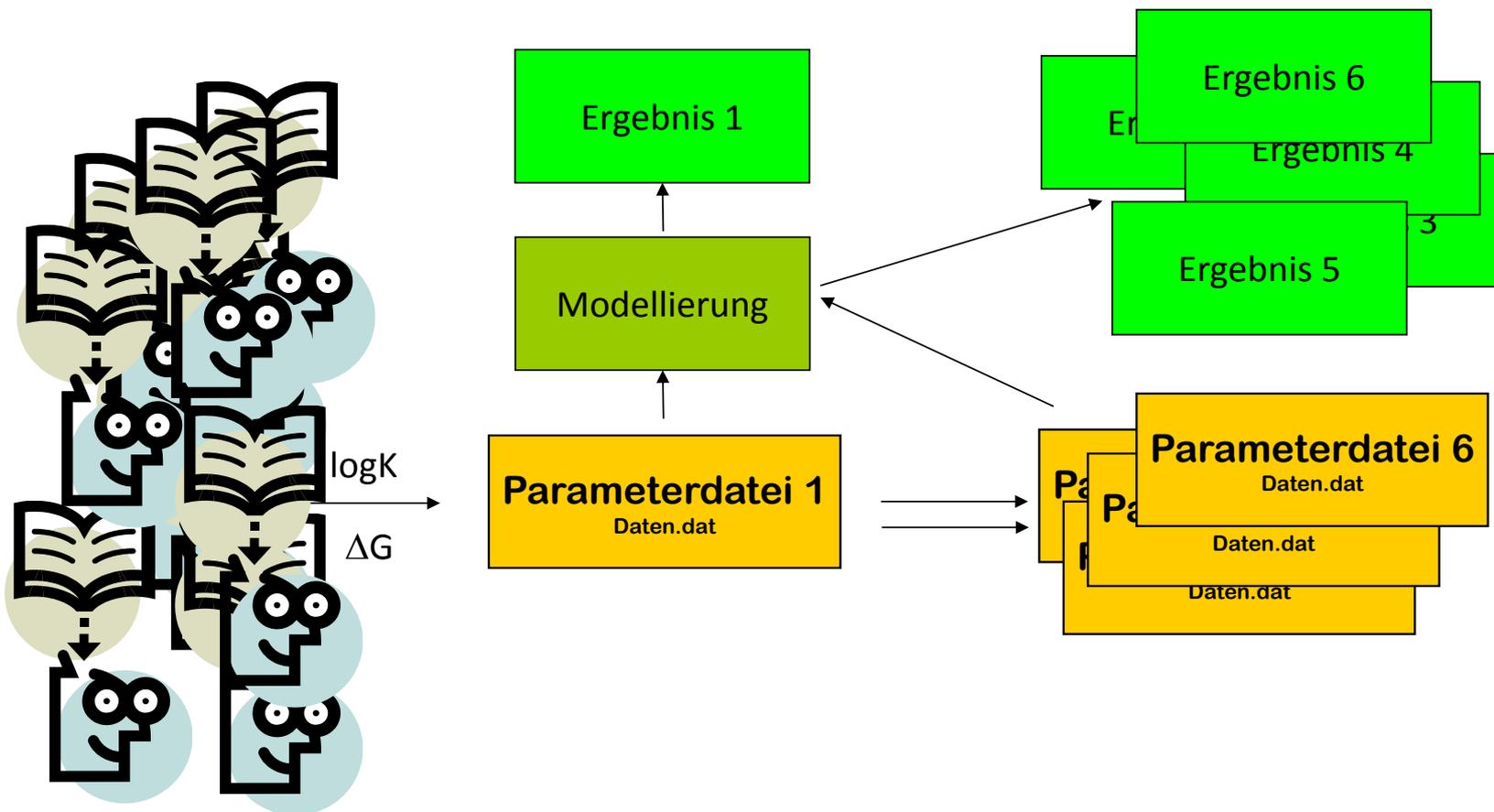


Was brauchen wir, um eine thermodynamische Gleichgewichtsmodellierung durchführen zu können?

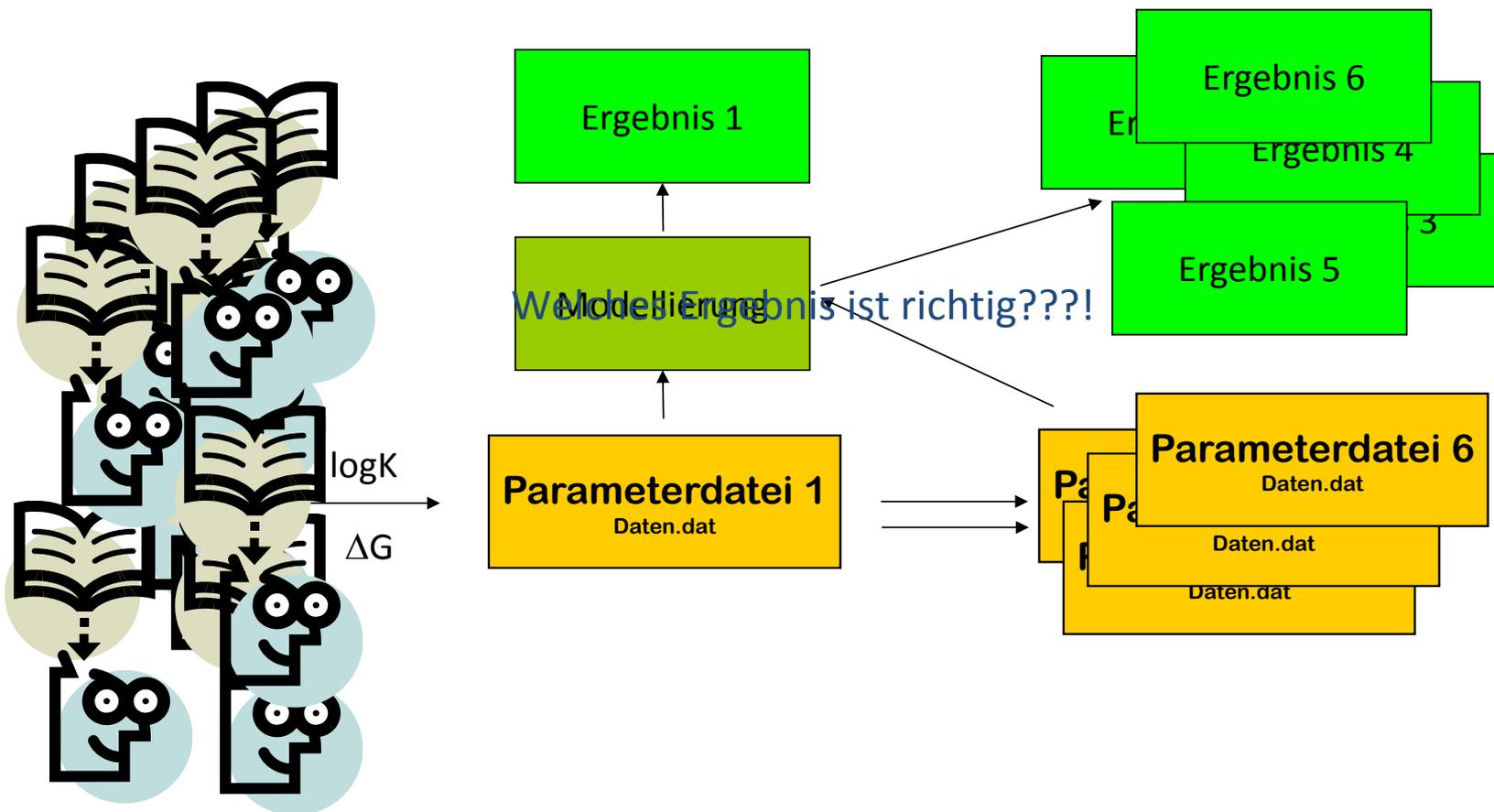


Von welcher „Parameterdatei“ sprechen wir, wenn wir Modellrechnungen für die Sicherheitsanalyse durchführen wollen??!

Thermodynamische Gleichgewichtsmodellierung in der Praxis

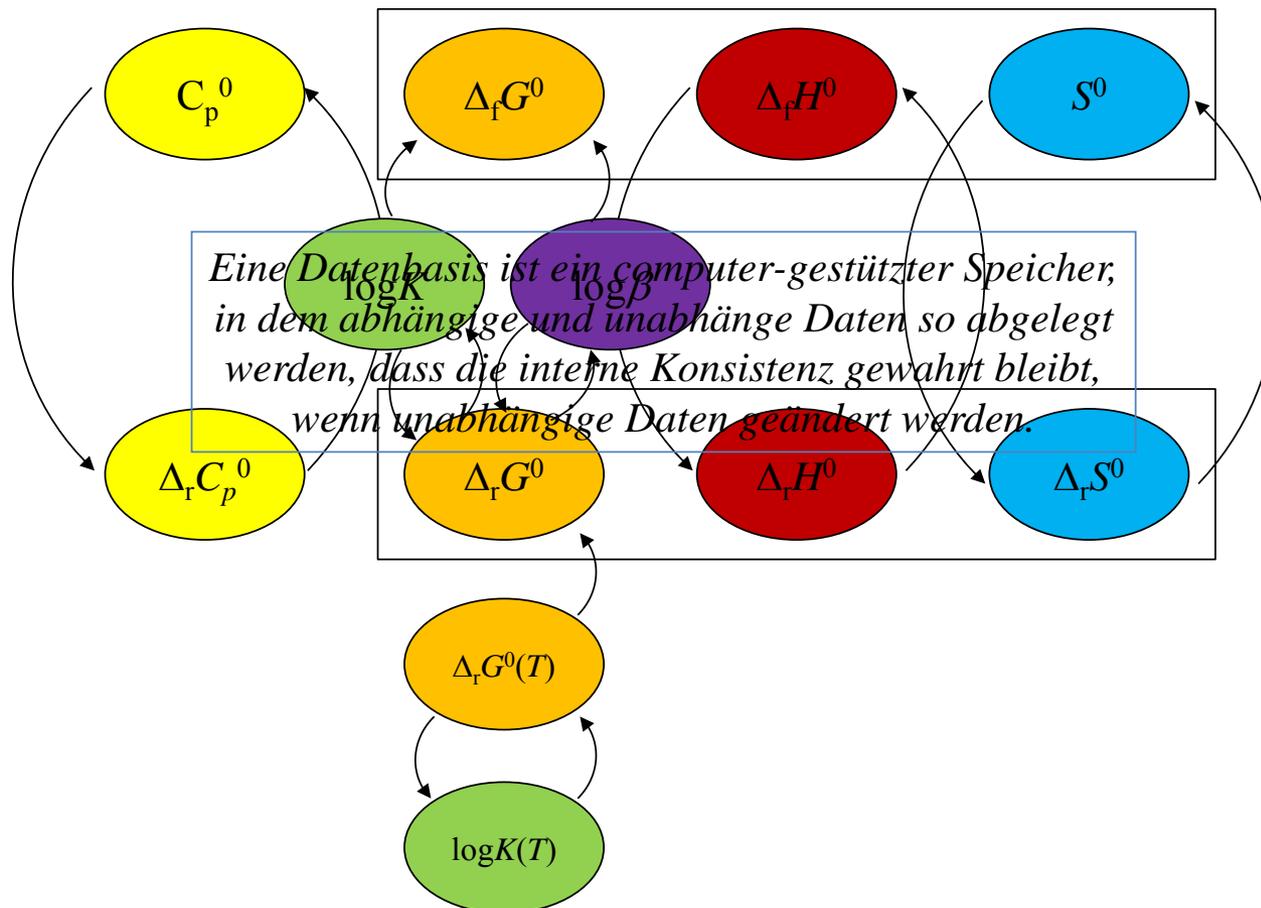


Thermodynamische Gleichgewichtsmodellierung in der Praxis



Was ist eine „thermodynamische Datenbasis“?

Datenkonsistenz



Weitergehende Anforderungen

- Rückverfolgbarkeit
- Öffentliche Verfügbarkeit
 - Einzeldaten
 - Vollständige Parameterdateien für die wichtigsten geochemischen Codes
- Langfristige Verfügbarkeit
- Umfassender Datenbestand
- Zuordnung von Qualitätskriterien
- Spezifisch für Deutschland
 - Wechselwirkungsparameter für hochsalinare Lösungen
 - Konsistenz thermodynamischer Daten mit diesen Wechselwirkungsparametern

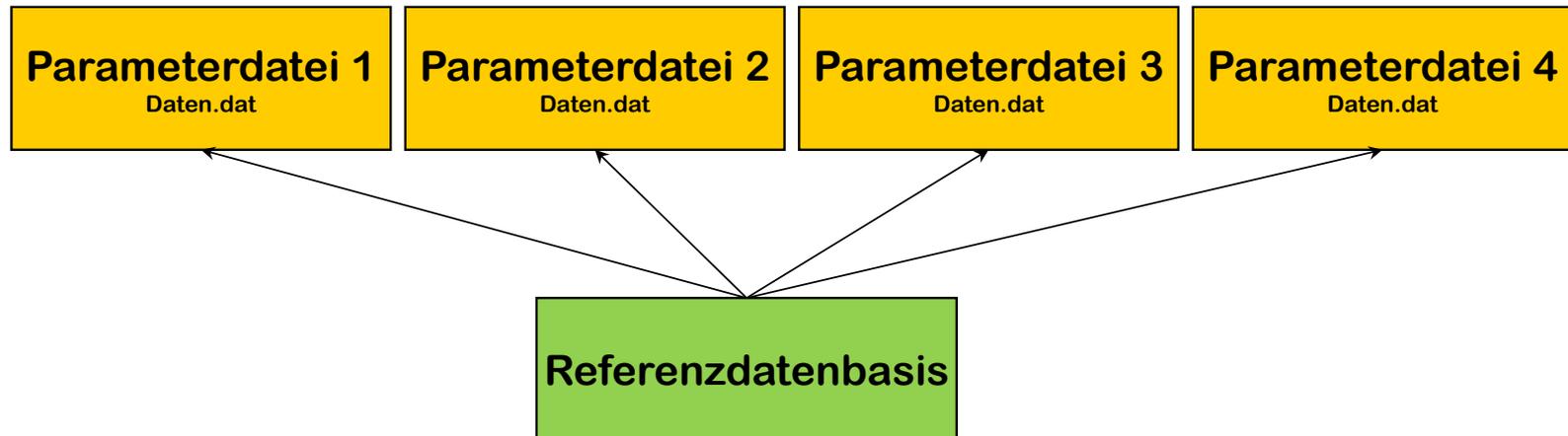
Unser Weg in die Zukunft der thermodynamischen Gleichgewichtsmodellierung

- Schaffung einer einheitlichen, qualitätsgesicherten Datenbank für thermodynamische Daten
- Bündelung von Kompetenzen
- Leichte Verfügbarkeit über das Internet



Grundidee

Geochemische Rechnungen unterschiedlicher Institutionen werden dadurch vergleichbar, dass Parameterdateien aus einer gemeinsam erstellten Referenzdatenbasis generiert werden.



Weitere Projekte

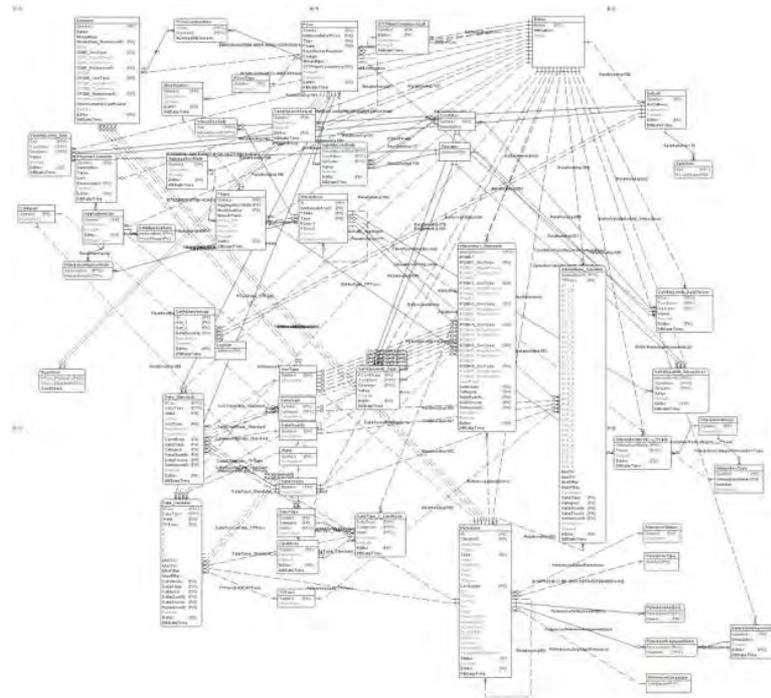
- Projektlaufzeit und BfS
- Projektlaufzeit Bewilligung

Wi, BMBF
MWi, BMBF,

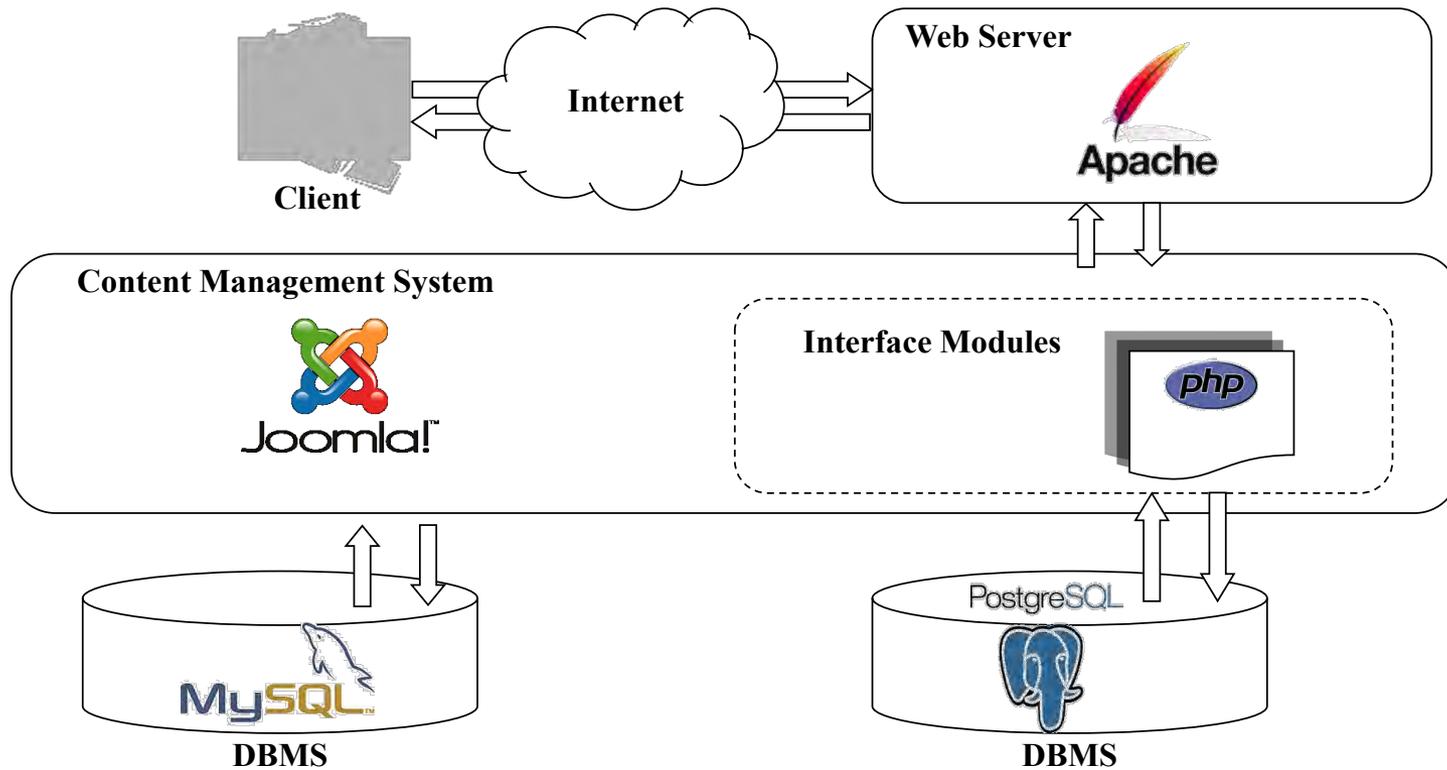
Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft	
Institut für Nukleare Entsorgung (INE)	
Leiter: Prof. Dr. Th. Fanghänel	
An Teilnehmer	Datum: 18.10.2002 Bearbeiter/-in: Dr. Bernhard Kienzler Telefon 07247/82-4467 Telefax 07247/82-4308 E-mail: kienzler@ine.fzk.de Unser Zeichen: Ihre Mitteilung: Seitenzahl: 3
Protokoll des Treffens zu Thermodynamische Standard Datenbasis 15. + 16. 10. 2002 im FZK-INE	
Teilnehmer: Dr. Herbert, Dr. Hagemann, Dr. Moog, Dr. Mönig, GRS-BS Dr. Brendler, FZR Prof. Voigt, TU-Freiberg Dr. Amme, ITU Dr. Wilhelm, Colenco Dr. Bittdorf, FZK-PTWT+E Prof. Fanghänel (zeitweise), Dr. Kienzler, Dr. Altmaier, Dr. Bosbach, Dr. Lützenkirchen, Dr. Marquardt, Dr. Metz, Dr. Neck, FZK-INE	
Prof. Fanghänel begrüßte die Teilnehmer und gab einen Überblick über die bisherigen Bemühungen um Standardisierung geochemischer Daten zur Modellierung von Endlagerfragestellungen in Deutschland und international. Deutschland hat im Gegensatz zu anderen Ländern dieses Problem bisher nicht angegangen. Die notwendige Expertise ist in Deutschland vorhanden. Ein entsprechendes Vorhaben ist allerdings eine langfristig ausgelegte Sache,	

Technische Grundlagen

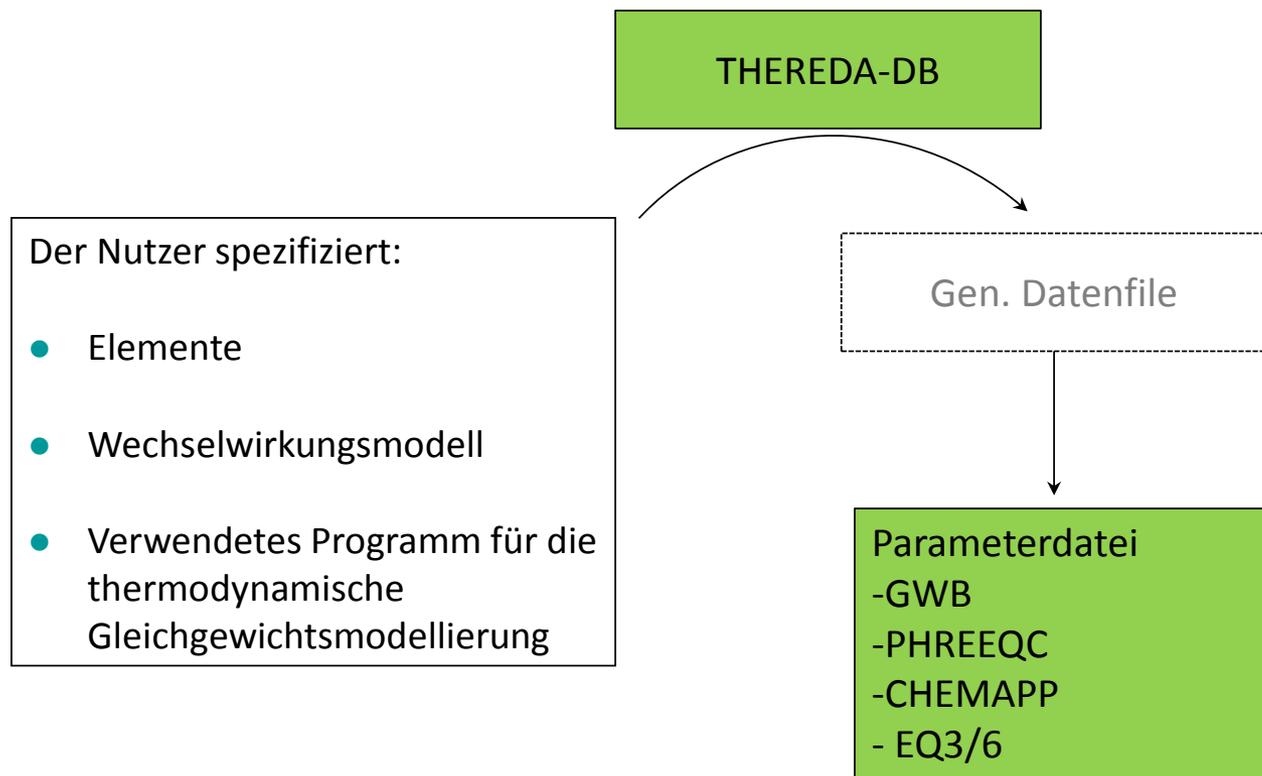
- Datenbanksystem = PostgreSQL
 - Tabellen: >56
 - Spalten: >370
 - Beziehungen: >120



Technische Grundlagen



Verwendung durch den Anwender



Zugriff über das Internet

www.thereda.de

Startseite

Freitag, 11. Juni 2010

WILLKOMMEN BEI THEREDA

THEREDA (Thermodynamische Referenzdatenbasis) ist ein Projekt, welches im Jahr 2006 gestartet wurde. Hauptziel ist die Erstellung einer umfassenden und intern konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für die geochemische Modellierung der Nah- und Fernfeldprozesse in verschiedenen Gesteinsformationen, welche als potenzielle Endlager in Deutschland diskutiert werden. Das Projekt wird gemeinsam von den wichtigsten Forschungsinstitutionen, die auf dem Gebiet der Endlagerung von radioaktiven und (chemo)toxischen Abfällen arbeiten, geplant und durchgeführt ([THEREDA-Partner](#)).

Parallel zum Aufbau der Datenbasis wird diese Webseite erstellt. Das Portal soll künftig sowohl potenziellen Nutzern den Zugang zur Datenbasis ermöglichen als auch als Informations- und Diskussionsplattform zur Datenbasis dienen. Da Datenbasis und Webseite noch im Aufbau sind, sind [Kommentare und Anregungen](#) ausdrücklich erwünscht.

Weitere Details zum THEREDA-Projekt finden Sie in der [Einführung](#) und im Handbuch zur Datenbank, wobei letzteres nach Fertigstellung angeboten wird.

Im Menüpunkt [Downloads](#) finden Sie Dokumente zum THEREDA-Projektstand, Veröffentlichungen und Vorträge.

PROJEKTFÖRDERUNG

Dieses Projekt wird gemeinsam gefördert von [BMBF](#) (GRS: 02C1426/02C1628, FZD: 02C1436, TU-BAF: 02C1446), [BMWj](#) (FZK/KIT: 02E10126/02E1067, FZD: 02E10136, GRS: 02E10146, TU-BAF: 02E10709) und [BfS](#) (mit Mitteln des [BMU](#)).

[Bundesministerium für Bildung und Forschung](#) [Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie](#) [Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit](#) [Bundesamt für Strahlenschutz](#)

Die projektbegleitende Betreuung erfolgt durch den [Projekträger Forschungszentrum Karlsruhe, Bereich Wassertechnologie und Entsorgung \(WTE\)](#).

NEWS: THEREDA-FORUM

Neu auf unserer Webseite ist das [THEREDA-Forum](#). Es dient als Informations- und Diskussionsplattform zur Datenbasis und zu Fragen zum Datenzugang. Das Forum ist in verschiedene Kategorien unterteilt, die von den jeweiligen Spezialisten moderiert werden.

Bitte beachten Sie, dass ein nicht registrierter Benutzer lediglich im Forum lesen darf, während registrierte Benutzer berechtigt sind, auch im Forum zu schreiben.

Wir haben 3 Gäste online

Login

Benutzername

Passwort

Angemeldet bleiben

[Anmeldung](#)
[Passwort vergessen?](#)
[Benutzername vergessen?](#)
[Registrieren](#)

Internet | Geschützter Modus: Inaktiv

Zugriff über das Internet

- Datenabfrage erfolgt interaktiv mit dem Anwender
- Thermodynamische Daten und Wechselwirkungs-Parameter

Please select an Element

H																			He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne		
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar		
K	Ca		Ti			Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn		Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr		Zr				Tc				Ag	Cd		Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	Ce	Nd	Sm										Hg	Tl	Pb	Bi		
	Ra	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm											

Datacategory / Phase type

Thermodynamic data gaseous phase
 aqueous species
 solid phase

Interaction data

Temperature (in °C)
 from to

PITZER
 SIT
 Extended Debye-Hückel

Zugriff über das Internet

- Spezies nach Phasenzugehörigkeit und Oxidationszahl des Zentralelements
- Thermodynamische Daten der reinen Elemente
- Mit [Show Data] Anzeige von Detailtabellen

SINGLE DATA QUERY

Temperature: Standard 298.15 K, Interaction model: PITZER

Elementspecific data:

Name: Uranium (U)
 Atomic number: 92
 Molar mass: 238.02891 g / mol
 Entropy: 50.2 ± 0.2 J / (mol*K)
 Heat capacity: 27.66 ± 0.05 J / (mol*K)

There are 9 species with datasets available for your selection.

[Back](#) [Show data](#)

gas (0) Oxidation number none (2)
 aqueous (0) Oxidation number 4 (1)
 solid (9) Oxidation number 6 (6)

Species	Phase	Oxidation number	Number of datasets
<input checked="" type="checkbox"/> Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	Uranophane	6	8
<input checked="" type="checkbox"/> K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	Compreignacite	6	8
<input checked="" type="checkbox"/> KUO ₂ (SiO ₃ OH)·H ₂ O(cr)	Boltwoodite	6	8
<input checked="" type="checkbox"/> Na ₂ (UO ₂) ₂ (Si ₂ O ₆) ₃ ·4H ₂ O(cr)	Na-Weeksite	6	8
<input checked="" type="checkbox"/> U(HPO ₄) ₂ ·4H ₂ O(cr)	U(HPO ₄) ₂ ·4H ₂ O(cr)		8
<input checked="" type="checkbox"/> (UO ₂) ₃ (PO ₄) ₂ ·4H ₂ O(cr)	(UO ₂) ₃ (PO ₄) ₂ ·4H ₂ O(cr)	6	7
<input checked="" type="checkbox"/> UO ₂ (SO ₄)·3H ₂ O(cr)	UO ₂ (SO ₄)·3H ₂ O(cr)		7
<input checked="" type="checkbox"/> UO ₃ ·2H ₂ O_Schoepite(cr)	Schoepite	6	8
<input checked="" type="checkbox"/> U(OH) ₂ (SO ₄)(cr)	U(OH) ₂ (SO ₄)(cr)	4	8

[Show data](#)

[Back](#)

Zugriff über das Internet

- Export von Daten als CSV oder Excel
- Tool-Tips mit Zusatzinformationen (Reaktionsgleichung, Daten-Klassifizierung, Angaben zur Referenz)

SINGLE DATA QUERY

Temperature: Standard 298.15 K, Interaction model: PITZER

70 dataset(s) found for your selection.

[more info in tooltips](#)

[Back](#) [Export as CSV-File](#) [Export as Excel-File](#)

Phase / Species	Datatype	Value ± Error	Unit	Data class	Data quality	Data source	Reference
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	CP298		J mol-1 K-1	6NA	6	6	NotYetPublished
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	DFG298	-6205310.658169	J mol-1	6NA	6	6	NotYetPublished
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	DFH298		J mol-1	6NA	6	6	NotYetPublished
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	DRG298	53769.755931	J mol-1	-1R	-1	-1	InternallyCalculated
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	DRH298			Reaction Ca<2+> + 2 UO2<2+> + 2 Si(OH)4<0> + 5 H2O(l) => 6 H<+> + Ca(UO2)2(SiO3OH)2:5H2O(cr)			
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	DRS298		J mol-1 K-1	6NA	6	6	NotYetPublished
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	LOGK298	-9.42 ± 0.48	1	1R	1	1	GUI/FAN2003 NGU/SIL1992
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	S298		J mol-1 K-1	6NA	6	6	NotYetPublished
Compreignacite K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	CP298		J mol-1 K-1	6NA	6	6	NotYetPublished
Compreignacite K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	DFG298	-10337080.727653 ± 10956	J mol-1	-1R	-1	-1	InternallyCalculated
Compreignacite K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	DFH298		J mol-1	6NA	6	6	NotYetPublished
Compreignacite K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	DRG298	211768.359347 ± 3082	J mol-1	-1R	-1	-1	InternallyCalculated
Compreignacite K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	DRH298		J mol-1	6NA	6	6	NotYetPublished

Zugriff über das Zusammenstellung komplexer

The screenshot shows a web browser window displaying the 'Komplexe Systeme' page. The page features a navigation menu on the left, a main content area with a periodic table, and a 'JSON-DATEN EXPORT' section. A large, tilted window in the foreground displays a JSON file named 'Am-Cm-Nd.json'. The JSON data includes fields for 'interactiontype', 'pcon_1', 'pcon_2', 'pcon_3', 'description', and a series of 'ip' (interaction parameters) for elements from IP298_1 to IP298_6. The 'ip' fields include 'unctype', 'negativeunc', and 'positiveunc' values. The 'description' field for 'IP298_5' is 'InternallyCalculated'.

```
26664 {
26665   "interactiontype": "Pitzer_binary",
26666   "pcon_1": "Hg<2+>",
26667   "pcon_2": "HSO4<->",
26668   "pcon_3": null,
26669   "description": null
26670 },
26671 "IP298":
26672 {
26673   "ip298_1": 0.519247124858822,
26674   "ip298_1_unctype": null,
26675   "ip298_1_negativeunc": 0,
26676   "ip298_1_positiveunc": 0,
26677   "ip298_2": 1.72897920500331,
26678   "ip298_2_unctype": null,
26679   "ip298_2_negativeunc": 0,
26680   "ip298_2_positiveunc": 0,
26681   "ip298_3": 0,
26682   "ip298_3_unctype": null,
26683   "ip298_3_negativeunc": 0,
26684   "ip298_3_positiveunc": 0,
26685   "ip298_4": -0.0120293482391887,
26686   "ip298_4_unctype": null,
26687   "ip298_4_negativeunc": 0,
26688   "ip298_4_positiveunc": 0,
26689   "ip298_5": 2,
26690   "ip298_5_unctype": null,
26691   "ip298_5_negativeunc": 0,
26692   "ip298_5_positiveunc": 0,
26693   "ip298_6": 0,
26694   "ip298_6_unctype": null,
26695   "ip298_6_negativeunc": 0,
26696   "ip298_6_positiveunc": 0,
26697   "calcmode": "CTPFUNC",
26698   "dataquality": -1,
26699   "datasource": -1,
26700   "reference_1": "InternallyCalculated",
26701   "reference_2": null,
26702   "description": null
26703 },
26704 "IPT":
26705 {
26706   "tpfunc": "Pitzer-function",
26707   "ip_1_a": -231093.453605148,
26708   "ip_1_b": 4168.95852667027,
26709   "ip_1_c": -654.035128750977,
26710   "ip_1_d": 0.610276753021829,
26711   "ip_1_e": 0,
26712   "ip_1_f": 13434138.4208311,
26713   "ip_2_a": 0,
26714   "ip_2_b": 1.72897920500331,
26715   "ip_2_c": 0,
26716   "ip_2_d": 0,
26717   "ip_2_e": 0,
26718   "ip_2_f": 0,
26719   "ip_3_a": 0,
26720   "ip_3_b": 0,
26721   "ip_3_c": 0,
26722   "ip_3_d": 0,
26723 }
```

Zugriff über das Internet Zusammenstellung komplexer Datensätze (Parameterdateien)

- Speicherung der md5-Prüfsumme jeder heruntergeladenen Datei
- Benchmarkrechnungen werden dokumentiert und dem Anwender mit zur Verfügung gestellt

The screenshot shows a web browser window titled "THEREDA - Parameterdatei Export - Windows Internet Explorer". The address bar displays "http://www.thereda.de/thereda-output/paramFile.do". The page content includes a periodic table with checkboxes for selecting elements. Below the table, there is a "Zielcode" dropdown menu with options: "ChemApp Export", "ChemApp Exporter", "EQ3/6-Exporter", "GWB", "JSON Exporter", and "PhreeqC-Exporter". A button labeled "Export herunterladen" is visible at the bottom.

Offener und kostenloser Zugang zu thermodynamischen Referenzdaten

Zusätzliche Qualitätssicherung durch Rückmeldungen aus Anwenderkreisen

Startseite → Forum

Freitag, 11. Juni 2010

Aktuelle Beiträge Kategorien Regeln

Willkommen, Besucher
Bitte [anmelden](#) oder [registrieren](#). [Passwort vergessen?](#)

Thereda
 (1 Leser) (1) Besucher

Stoffliche Systeme
Hier werden stoffliche Systeme diskutiert.

Forum	Themen	Antw.	Letzter Eintrag
Salze, ozeanische Salze Moderation: Wolfgang Voigt	0	0	Keine Beiträge
Actiniden Moderation: Christian Marquardt	0	0	Keine Beiträge
Zement Moderation: Stefan Wilhelm	0	0	Keine Beiträge
Uran, Radium Moderation: Vinzenz Brendler	0	0	Keine Beiträge
Cäsium, Rubidium, Strontium Moderation: Tina Scharge	0	0	Keine Beiträge

WWW-Präsenz

Forum	Themen	Antw.	Letzter Eintrag
Allgemeines	0	0	Keine Beiträge
Datenabfragen Moderation: Vinzenz Brendler	0	0	Keine Beiträge
Code-spezifische Formate Moderation: Helge Moog	0	0	Keine Beiträge
JSON & Parser-Entwicklung Moderation: Helge Moog	0	0	Keine Beiträge

Daten & Qualitätssicherung

Forum	Themen	Antw.	Letzter Eintrag
-------	--------	-------	-----------------

Wir haben 3 Gäste und 1 Mitglied online

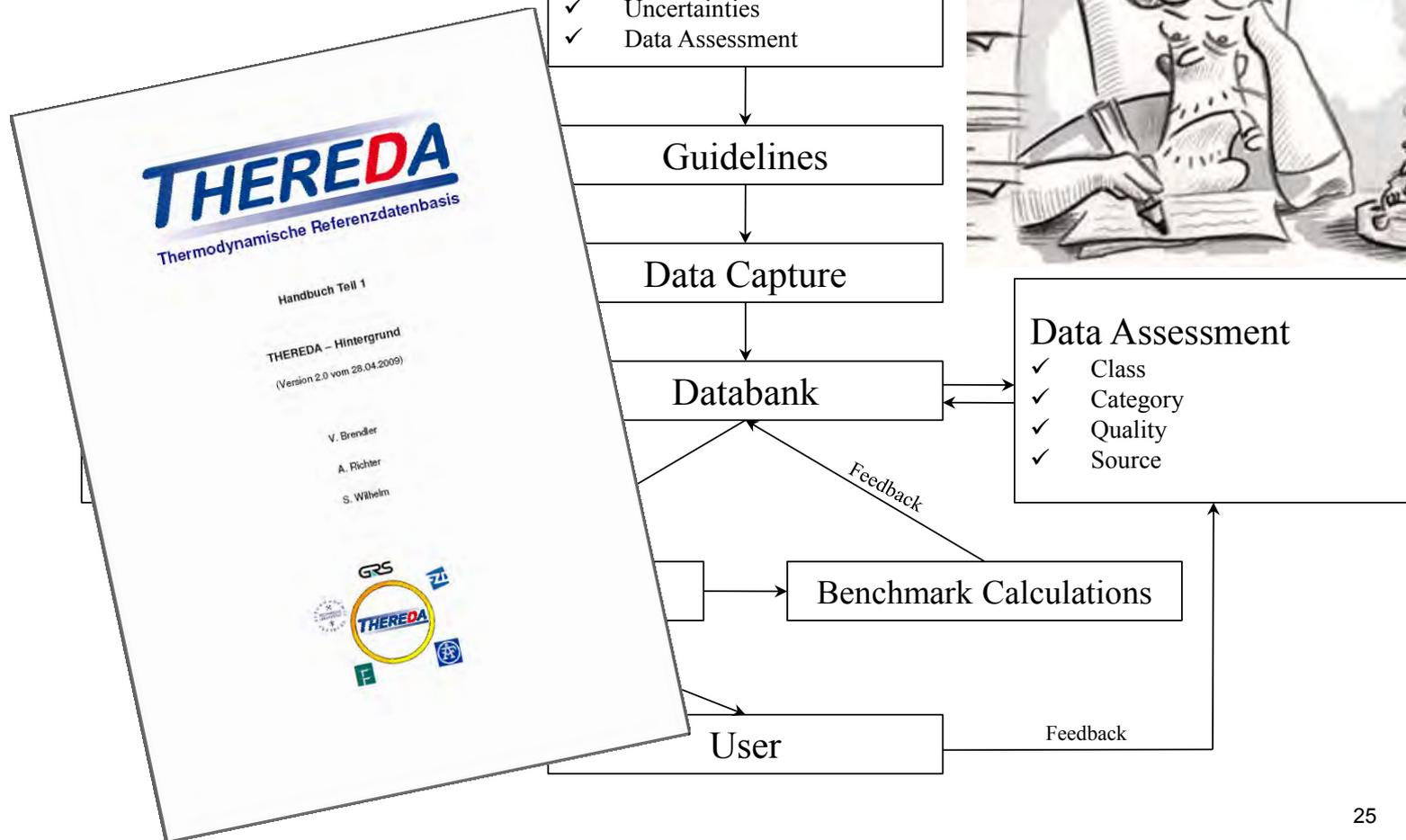
Internet | Geschützt

Derzeitiger Umfang (Auszug)

Umfang

- 196 Phasen
- 312 aq. Spezies (davon 34 Primary Master)
- 336 Bildungsreaktionen
- 789 Standard Datensätze (Pitzer)
- 717 Wechselwirkungen (Pitzer und SIT)

Qualitätssicherung und Arbeitsfluss in THEREDA



Laufende Aktivitäten

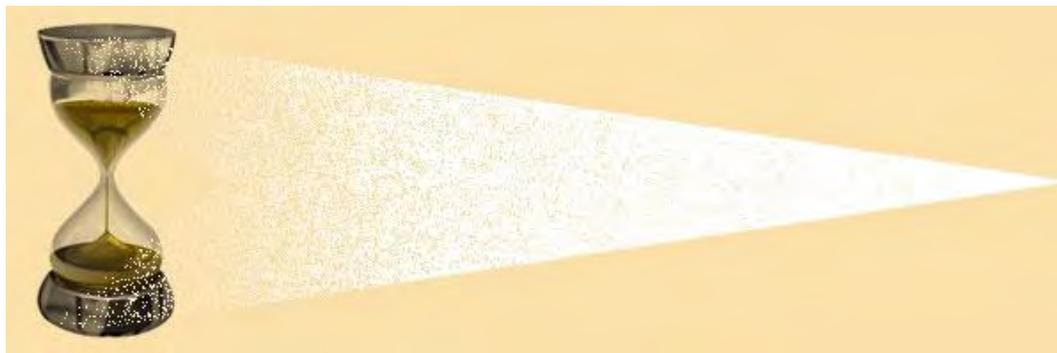
- Vorbereitungen zur Freigabe der Datenbasis für
 - System der ozeanischen Salze (für einige Subsysteme bis 300°C)
 - Am, Cm, Nd
- Fertigstellung der Export-Programme für
 - Geochemist's Workbench (GWB)
 - CHEMAPP
 - EQ3/6
 - PHREEQC
- Durchführung und Dokumentation der Benchmarkrechnungen

Aktivitäten in naher Zukunft

- Planungen für eine web-basierte Bedienoberfläche
- Implementierung eines internen Audits (zu erproben an den Systemen, die zur Freigabe vorgesehen sind)
- Vorbereitungen zur Speicherung von Sorptionsdaten
- Freigabe der Daten für N_p und P_u ~ Sommer 2011

Langfristige Nutzbarkeit

- Nutzung quelloffener Programme
- Geringer Abstraktionsgrad des Datenmodells
- Dokumentation der Datenbankstruktur
- Flexible Datenbankstruktur
- Verbund aus fünf Forschungsinstitutionen



Zusammenfassung

- Mit THEREDA steht eine webbasierte, den Stand von Wissenschaft und Technik repräsentierende thermodynamische Referenzdatenbank für die Belange der Endlagerung nuklearer und chemotoxischer Abfälle in Deutschland zur Verfügung. Geringer Abstraktionsgrad des Datenmodells
- Bündelung von Kompetenzen
- Umfassender Datenbestand
- Codespezifische Parameterdateien verfügbar
- Instrument zur Forschungssteuerung und Qualitätssicherung für Behörden, Dienstleister und Forschungsinstitutionen
- Zukünftige Erweiterungen der thermodynamischen Datenbasis im Verbund mit THEREDA

Danksagung...

- ... an BMWi, BMBF und BfS für die Finanzierung
- ...an den Projektträger für die stets wohlwollende und konstruktive Unterstützung
- ...an Herrn Köster für Unterstützung in schweren Zeiten
- ...an die Kolleginnen und Kollegen aus dem Verbund, ohne die es dieses Projekt nicht gäbe

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung und Sorption von Actiniden

Verbundprojekt

**Wechselwirkung und Transport von Actiniden im natürlichen Tongestein
unter Berücksichtigung von Huminstoffen und Tonorganika**

9. Projektstatusgespräch, Karlsruhe 2010

Sven Krüger, Notker Rösch

Theoretische Chemie, Technische Universität München, Garching

- **Methoden und Modelle**
- **Verbundprojekt**
- **Thermodynamische Parameter**
- **Komplexierung durch Huminstoffe**
- **Sorption auf Tonmineralen**

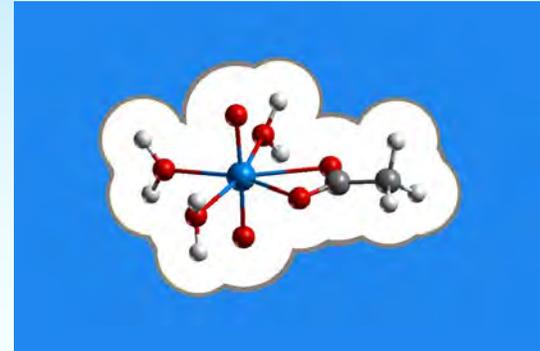
Methoden

- **Quantenmechanische Modellierungen auf atomarem Niveau**
Berechnung elektronischer Strukturen und abgeleiteter Größen
- **“First principles”-Ansatz**
Nur technische Parameter
im Gegensatz zu empirischen Methoden,
die Parameter aus Experimenten verwenden
- **Dichtefunktionalmethode**
in relativistischer Form für schwere Elemente

- **Komplexe in Lösung**

Quantenmechanische Behandlung eines Komplexes und seiner direkten Solvatumgebung, Kontinuumsmodell für langreichweitige Lösungsmittelleffekte

Programm ParaGauss

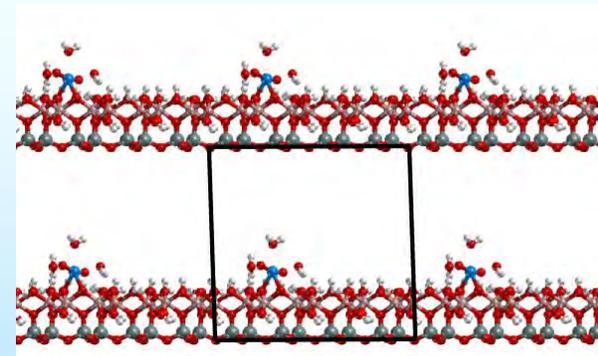


- **Sorbierte Komplexe**

Oberflächen als periodische Schichten, Anwendung von Methoden für Festkörper Große Einheitszellen für isolierte Adsorbate

Programme VASP (Universität Wien)

und NWChem (Pacific Northwest National Laboratory)



Beiträge zur Langzeitsicherheitsanalyse

- Thermodynamische Daten
- Charakterisierung von Spezies
- Mechanismen und Prozesse auf atomarem Niveau
- Modellvorstellungen
als Grundlage von empirischen Modellen und Abschätzungen

- Vorgehen und Ergebnisse komplementär zum Experiment

Verbundprojekt

Wechselwirkung und Transport von Actiniden im natürlichen Tongestein unter Berücksichtigung von Huminstoffen und Tonorganika

- Beiträge zum Langzeitsicherheitsnachweis eines nuklearen Endlagers
 - Actinidenchemie
- Vom Modelltonmineral Kaolinit zum natürlichen Tongestein (Opalinuston, Mont Terri, Schweiz)
- Einfluss natürlicher Organika
 - insbesondere Huminstoffe und Tonorganika
- Aktuelle Aspekte
 - Temperaturabhängigkeit der Sorptions- und Komplexierungschemie
 - Diffusion
 - Charakterisierung von Tonorganika
 - Einfluss auf Sorption und Mobilisierung

Verbundprojekt



Institut für Radiochemie

U, Np, Am, Sorption, Diffusion,
Komplexierung durch Huminstoffe, synthetische Huminstoffe
UV-Vis-NIR, TRLFS, ATR FT-IR, EXAFS, XANES

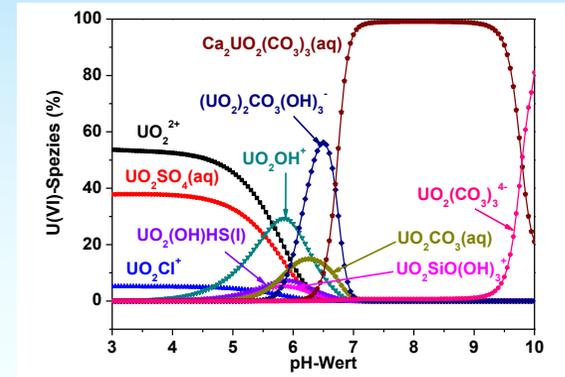
Abteilung Reaktiver Transport, Leipzig

Tb, Sorption, Effekt von Tonorganika,
Diffusion von Radiotraceren mit
Positronen-Emissions-Tomographie (PET)

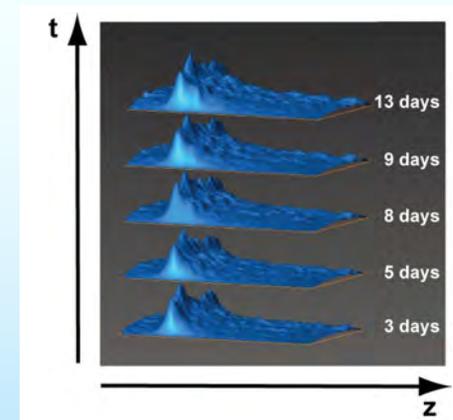


Sachgebiet Strahlenschutz,
Professur für Radiochemie

Am, Eu, Sorption, Komplexierung durch Organika
UV-Vis mit langer Flüssigwellenleiter-Kapillarzelle



Speziation von U(VI) in Opalinuston-Porenwasser mit Huminsäure



PET: Diffusion von ¹²⁴I in Opalinuston

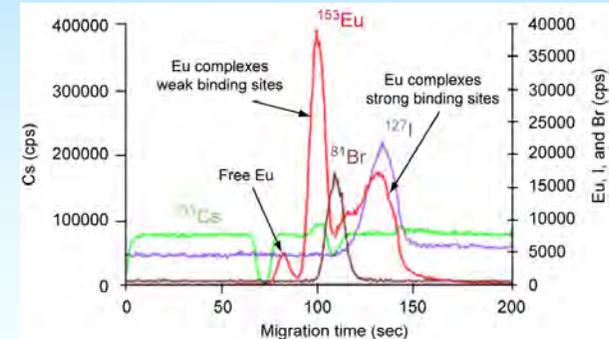
Verbundprojekt



UNIVERSITÄT
DES
SAARLANDES

Institut für Anorganische und
Analytische Chemie und Radiochemie

Lanthaniden, U, Sorption, Desorption,
Effekt von Huminstoffen, Tonorganika,
CE-ICP-MS, Miniatursäulenexperimente



CE-ICP-MS: Eu-Speziation
mit Huminsäure



Institut für Nukleare Entsorgung

Np, Pu, Am, Diffusion, Komplexierung mit Huminstoffen, Tonorganik,
Charakterisierung Ton/Organik, TRLFS, EXAFS, XANES, STXM, CE-ICP-MS

Universität Heidelberg, Physikalisch-Chemisches Institut

Cm, Eu, Komplexierung mit Tonorganik, TRLFS

Universität zu Köln, Abteilung Nuklearchemie

Actinidenspeziation, CE-ICP-MS



Verbundprojekt

JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ



Institut für Kernchemie

Np, Pu, Sorption, Diffusion, Speziation,
EXAFS, XANES, XPS, CE-ICP-MS, CE-RIMS



Institut für Chemie, Physikalische Chemie

Lanthaniden, Speziation,
Komplexierung mit Huminstoffen,
hochpräzise Laserspektroskopie

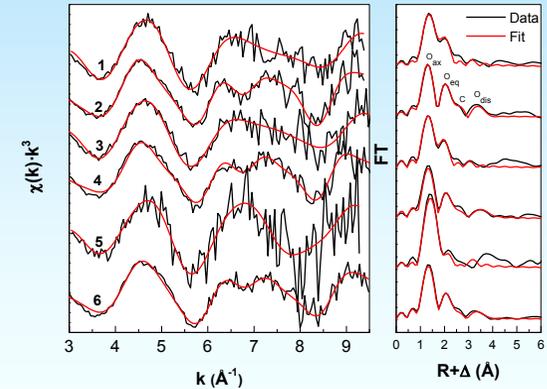


Fachgebiet für Theoretische Chemie

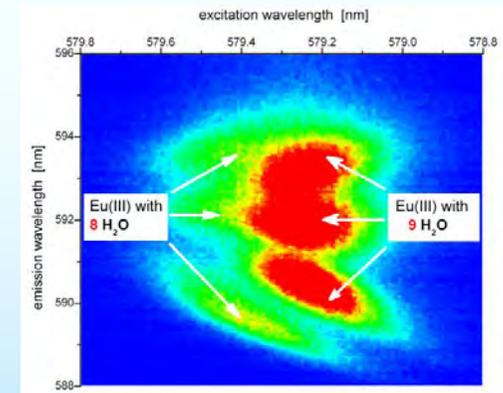
U, Np, quantenchemische Modellierungen,
Komplexierung in Lösung, Sorption auf Tonmineralen

Marquardt (Ed.) FZKA-Bericht 7407, 2008

Krüger



EXAFS: Np(V) Sorption
an Opalinuston



Lumineszenzspektrum
Eu(III) bei 4 K

Thermodynamische Parameter: Bildungsenthalpien

- **Bildungsenthalpie von Uranyl(VI)**

Moskaleva, Matveev, Krüger, Rösch *Chem Eur J* 12 (2006) 629

- Fundamentale Konstante der Uranchemie

- Frühere experimentelle Abschätzung: $\Delta_f H^\circ(\text{UO}_2^{2+}) = 311\text{--}430$ kcal/mol

Cornehl, Heinemann, Schwarz et al. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 1996

- Methode:

Bestimmung über Reaktionsenergien von Spezies mit bekanntem $\Delta_f H^\circ$

- 21 Reaktionen von UF_6 , UF_5 und UO_2 zu UO_2^{2+}

- Skalar-relativistische (SR) Rechnung, Beiträge der Spin-Bahnwechselwirkung ΔSO

- Ergebnis unabhängig von Reaktant

$\Delta_f H^\circ(\text{UO}_2^{2+})$ in kcal/mol

	SR	ΔSO	SO
UF_6	363±10	4.6	367±10
UF_5	355± 9	5.3	360± 9
UO_2	356± 9	11.4	368± 9
Mittel.	359±10	7.1	365±10

Bildungsenthalpie von Actinylen

- Bildungsenthalpie von Uranyl(VI)
- Sehr gute Übereinstimmung mit gleichzeitigem Experiment

Rechnung 365 ± 10 kcal/mol

Experiment 364 ± 15 kcal/mol

Moskaleva, Matveev, Krüger, Rösch *Chem Eur J* 12 (2006) 629

Gibson, Haire, Santos, Marçalo, de Matos *J. Phys. Chem. A* 2005

- Bildungsenthalpie von Plutonyl(VI)

16 Reaktionen von PuF_6 und PuF_4 zu PuO_2^{2+} : Rechnung 418 ± 15 kcal/mol

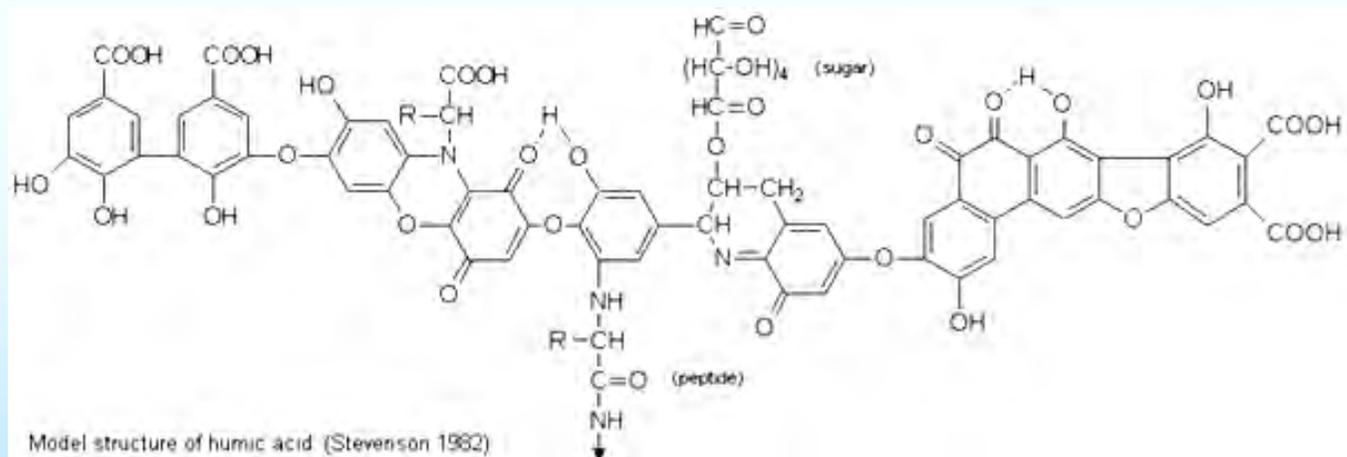
Experiment 413 ± 13 kcal/mol

Moskaleva, Matveev, Dengler, Rösch *Phys Chem Chem Phys* 8 (2006) 3767

Gibson, Haire, Santos, Marçalo, de Matos *J. Phys. Chem. A* 2005

Huminstoffe

- Huminstoffe: Fulvinsäuren, Huminsäuren, Humin
- Komplexieren Schwermetallionen, Redox-Eigenschaften
- Beeinflussen Speziation und Mobilität von Aktiniden
- Komplexierung hauptsächlich durch Carboxylgruppen angenommen, starke und schwache komplexierende Gruppen



Komplexierung durch Huminstoffe

- **Beitrag anderer funktioneller Gruppen zur Komplexierung**
Experimente FZ Dresden-Rossendorf
 - **Alkoholische und phenolische OH-Gruppen**
tragen bei, wahrscheinlich bereits bei $\text{pH} < 7$
Kremleva, Krüger, Rösch, *Inorg. Chim. Acta* 2009
 - **Stickstoffhaltige Gruppen:** Amine, Aminosäuren, Heterozyklen, ...
Kein Hinweis für Beitrag von Amininen, Pyridinringen
Aminosäuren liefern stabile Komplexe
Zakharieva, Kremleva, Krüger, Rösch, *Int. J. Quantum Chem.* Im Druck
C.-C. Chiu, Bachelorarbeit, TU München, 2008
 - **Schwefelhaltige Gruppen:** Thiole, Sulfide, Sulfone, Heterozyklen,
Experimentelle Hinweise auf Komplexierung durch Thiole,
Keine Komplexierung durch Sulfonsäuregruppen
Y. Zhang, Masterarbeit, TU München, 2009
 - **Phosphorhaltige Gruppen:** Phosphone, ...
Werden derzeit untersucht

Komplexierung durch alkoholische Gruppen

- Experimente zur Komplexierung durch phenolische OH-Gruppen in Huminsäuren

Blockierung phenolischer OH-Gruppen durch Methylierung:

- Komplexierung von U(VI) bei pH = 4, Np(V) bei pH = 7–8:

Verringerung der Beladungskapazität

Pompe et al. *Radiochim. Acta* 2000; Sachs, Bernhard, *Radiochim. Acta* 2005

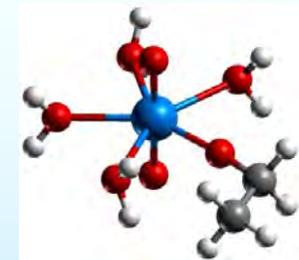
- Komplexierung von U(VI) bei pH = 2, Np(V) bei pH = 7:

Keine Effekte auf Struktur (EXAFS)

Schmeide et al. *Inorg. Chim. Acta* 2003; Sachs, Schmeide, et al. *Radiochim. Acta* 2005

- Beiträge zur Komplexierung bereits bei niedrigem pH ?
- Modellstudie an Uranyl(VI)-Alkohol- und -Alkoholatkomplexen

Kremleva, Krüger, Rösch, *Inorg. Chim. Acta* 362 (2009) 2542



Alkoholische Gruppen: Strukturen

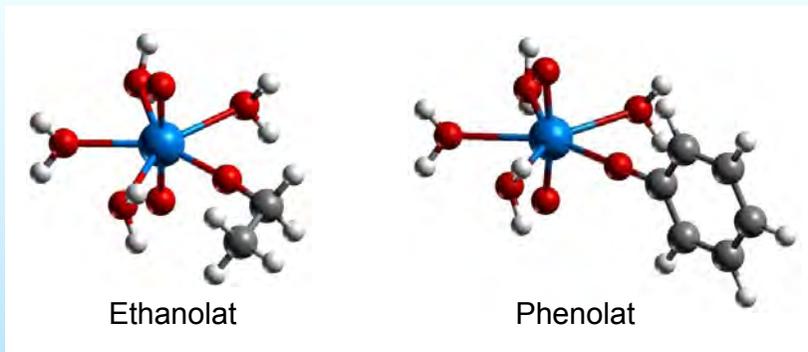
- **Komplexierung von Uranyl(VI) durch ROH-Modell-Liganden**
- Alkoholkomplexe nicht, Alkoholate stark gebunden
- Gemessene Parameter vergleichbar mit Carboxylaten
- Kein messbarer Unterschied durch Blockierung von OH-Gruppen zu erwarten

	R	U=O _t	U-O _C	U-C	U-O _{aq}	ΔG _f
OH	CH ₂ CH ₃	178	234	340	236	+16
	C ₆ H ₅	178	246	352	238	+57
O ⁻	CH ₂ CH ₃	181	208	337	237	-156
	C ₆ H ₅	180	217	333	237	-96
COO ⁻	CH ₃	179	229	335	236	-101
COOH	CH ₃	178	230	343	238	+20
EXAFS [†]	HS	178(1)			238(2)	
	HS‡	178(1)			239(2)	

Längen in pm, Energien in kJ/mol

[†] Schmeide et al. *Inorg. Chim. Acta* 2003

[‡] Blockierte phenolische OH-Gruppen



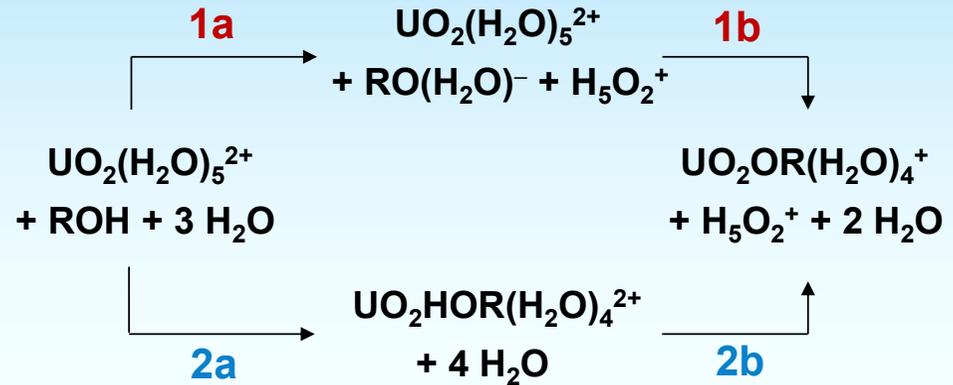
Alkoholische Gruppen: Energien

- **Komplexierung von Uranyl(VI) durch ROH-Modellliganden**

Freie Enthalpien in kJ/mol

1 Deprotonierung von ROH (a) gefolgt von Komplexierung (b)

2 Komplexierung an ROH (a) gefolgt von Deprotonierung des Komplexes (b)



R	1a	1b	2a	2b	ΔG_f
CH ₃	+164	-163	+8	-7	1
CH ₂ CH ₃	+168	-156	+16	-4	12
C ₆ H ₅	+126	-96	+57	-27	30

Kremleva, Krüger, Rösch, *Inorg. Chim. Acta* 362 (2009) 2542

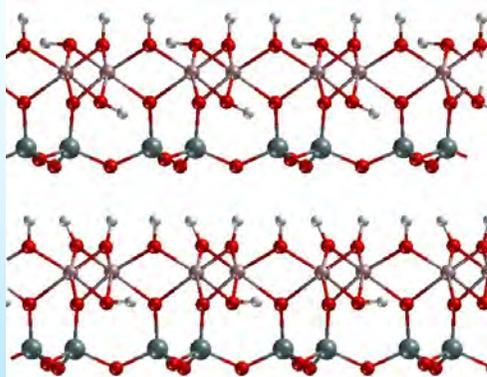
- Deprotonierung im Feld von Uranyl erniedrigt Barriere
- Komplexierung an OH-Gruppen bei niedrigem pH möglich

Sorption auf Tonmineralen



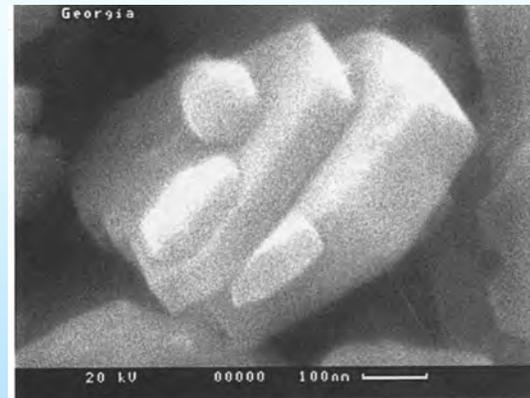
- Tone als natürliche und technische Barriere, diskutiert als potentielles Wirtsgestein (Schweiz)
- Tonminerale: Schichtsilikate
Aufbau aus dünnen Schichten (untereinander schwach gebunden), Kristallite typisch $< 2 \mu\text{m}$
Zbik et al., *Clays and Clay Miner.* 1998
- Beispiel **Kaolinit**
etwa 20 % in Opalinuston
- Oberflächen: $\sim 75 \%$ basal, $\sim 25 \%$ Kanten

basal (001) Al(o)



Kante

basal (001) Si(t)



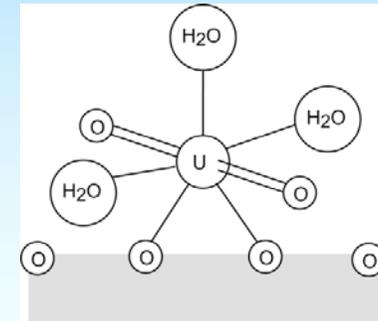
Uranyl-Sorption auf Tonmineralen

- Viele Batchexperimente, Parameterabhängigkeit bekannt, aber wenig Information auf atomarem Niveau

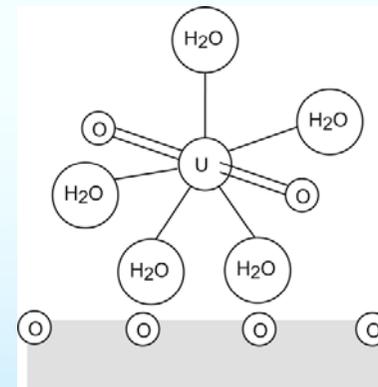
	Mineral	pH	U-O _t	U-O	U-Al/Si	U-O _{aq}
Sylvester 2000	Montm.	4	178			242(6.6)
Sylvester 2000		6.4	177	230(3.0) 248(2.7)		
Hennig 2002		7	178		340(0.2)	234(5.9)
Thompson 1998	Kaolinit	7.5	180	222(2.1) 249(2.9)	~330	238(5.0)
Reich 2007		5	179		310, 330	237(5.0)
Reich 2007		8.5	180		309, 329	236(5.0)

Längen in pm, Koordinationszahl in Klammern

- **Außersphärische Komplexe:**
Uranylbindung U-O_t und mittlere Bindung zu Liganden/Oberfläche U-O_{aq} ähnlich zu UO₂²⁺ in Lösung
- **Innersphärische Komplexe:**
Identifiziert über U-Al/Si-Kontakt und verschiedene U-O-Bindungslängen zu Liganden/Oberfläche
- Viele offene Fragen: Bevorzugte Oberflächen, Plätze, Spezies, ...



innersphärisch



außersphärisch

Uranyl-Sorption auf (001) Al(o) Kaolinit

- **Außersphärische Komplexe**
- EXAFS: Außersphärische Komplexe ~ Solvatisierte Ionen insbesondere gleiche Bindungen zu Wasserliganden
- Modelle mit Solvataion der Oberfläche durch Wassermonolage
- Zwei Modelle außersphärischer Komplexe

Erste Solvatationsschale von UO_2^{2+}

- **in Kontakt** mit Oberfläche

U-O_w aufgespalten:

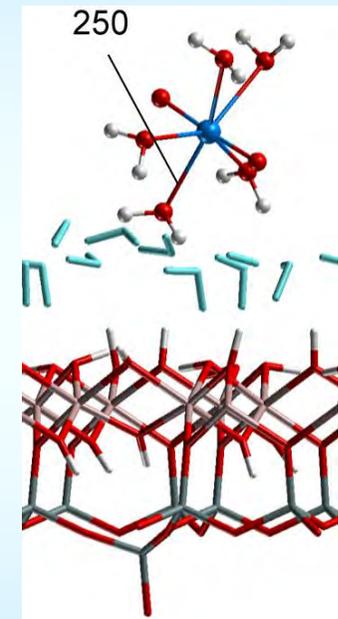
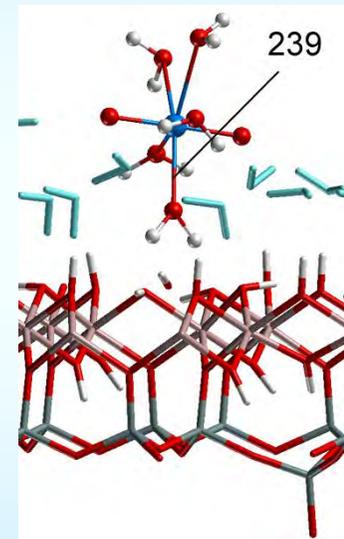
Al(o): 239 and 250–264 pm

Si(t): ebenso

- **Separiert** von Oberfläche

Keine kurzen U-O-Abstände, U-O_w = 250–265 pm

- GGA-Korrektur $\Delta\text{U-O}_{\text{äq}} \approx -8$ pm
- **Existieren verschiedene Typen außersphärischer Komplexe ?**



Uranyl-Sorption auf (001) Al(o) Kaolinit

- Innersphärische Komplexe

- Oberfläche Si(t) nicht reaktiv
- Auf Al(o): Mono- and bidentate Koordination
- Monodentate Komplexe – U-Al zu lang
- Bidentate Komplexe – entsprechen Exp. für deprotonierte Plätze

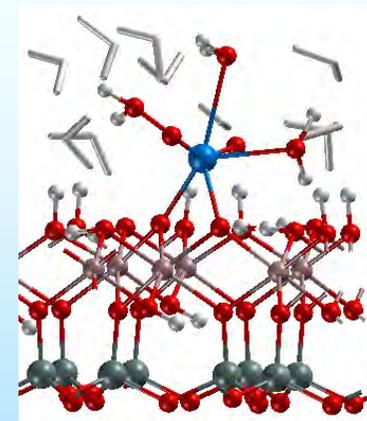
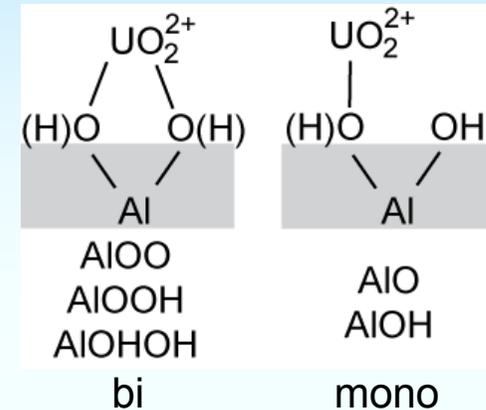
q	Platz	U-Al		
		Gas.	Solv.	
-2	bi	AIOO	311	315
-1		AIOOH	332	335
-1	mono	AIO	366	378
0		AIOH	398	398
Reich 2007			310, 330	
Thompson 1998			330	

Längen in pm

- Geringer Effekt des Lösungsmittelmodells

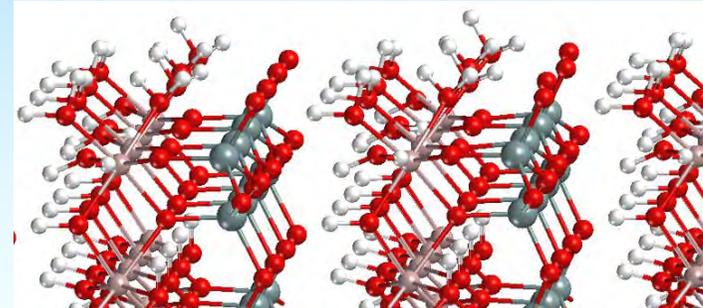
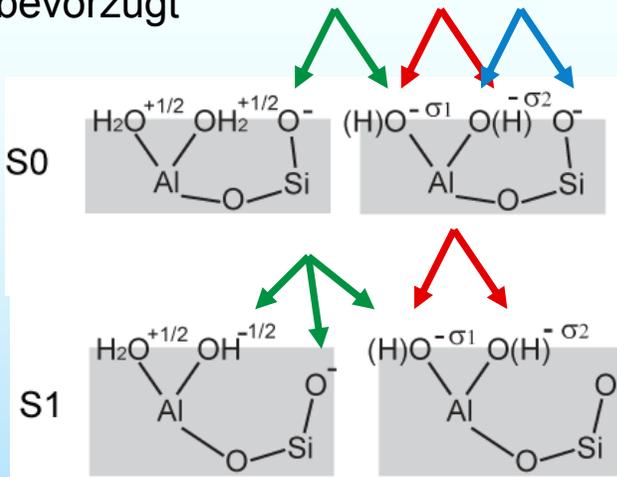
Kremleva, Krüger, Rösch, *Langmuir* 24 (2008) 9515

innersphärisch



Uranyl-Sorption: Vergleich mit Kantenflächen

- Sorption auf Al(o) (001)
Energetisch ungünstig, vorherrschende Oberfläche, Sorption möglich
- Sorption auf (010) Kantenflächen
Terminierungen S0 und S1
Energetisch bevorzugt,
gemischte Plätze ausgeschlossen
Aluminol- und verbrückende Plätze bevorzugt

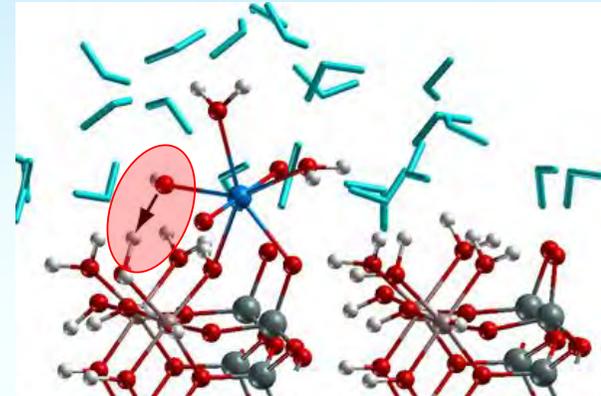


Oberf.	Platz		E_{rel}
Al(o)		AlOO	208
		AlO-AIO	234
S0	Aluminol	AlOO	138
		AlOOH	101
		AlOHOH	69
	Gemischt	AlO-SiO	153
		AlOH-SiO	154
		Verbr.	AlO-SiO
		AlOH-SiO	79
S1	Aluminol	AlOOH	15
		AlOHOH	111
	Verbr.	AlOH-SiO-AIOH	0

Bidentate Koordination, Energien in kJ/mol

Uranyl-Sorption auf (010) Kantenflächen

- EXAFS: Uranyl-Sorption auf Kaolinit bei pH 6–7.5
 - U-O = ~230 pm und ~250 pm
 - U-O_{ober} kürzer, U-O_w länger
 Thompson et al 1998
- **Hydrolyse an Oberfläche**
 UO_2OH^+ and $\text{UO}_2(\text{OH})_2$
 als Adsorbate durch Deprotonierung von Wasserliganden



- Konkurrenz zwischen Bindungen zu OH-Ligand und zur Oberfläche
- Kurze Bindungen, 220–240 pm: **U-OH**, U-O_{ober}
- Lange Bindungen, 254–270 pm: U-O_w, **U-O_{ober}**
- **Vorschlag einer erweiterten Interpretation**

Zusammenfassung

- Quantenmechanische Simulationen ergänzen und erweitern experimentelle Befunde auf unabhängiger Basis
- **Beispiele für Ergebnisse im Verbundprojekt**
 - **Bildungsenthalpie** von Actinolen
 - Beitrag **alkoholischer Gruppen** zur Komplexierung von Actiniden durch Huminstoffe bereits bei moderatem $\text{pH} < \text{pK}_s$
 - **Uranyl-Sorption auf Kaolinit:**
Erste systematische quantenchemische Studie zur Actinidensorption auf Mineraloberflächen
Kantenflächen bevorzugt
Experimentelle Befunde entsprechen bidentaten Komplexen
Verschiedene Komplexe: Aluminol- und verbrückende Plätze bevorzugt
Hydrolyse an Oberfläche
 - Ähnliche Ergebnisse für Kantenflächen von **Pyrophyllit**

Ausblick

- **Aufgaben für die Theorie**
 - Verbesserte Modellierung der Grenzfläche Mineral/Lösung
 - Genauere Thermochemie in Lösung und an Oberflächen
- **Aufgaben für das Experiment**
 - Differenzierung und Charakterisierung von Oberflächenspezies
- **Gemeinsame Entwicklung eines mechanistischen Verständnisses der Oberflächenchemie der Actiniden**

Geckeis, Rabung, *J. Contaminant Hydrology* 102 (2008) 187

Kremleva, Krüger, Rösch, *Radiochim. Acta* (2010) im Druck

Dank

- den Partnern im Verbundprojekt
- den Mitarbeitern C.-C. Chiu, A. Kremleva, A. Matveev, B. Martorell, L. Moskaleva, R. S. Ray, Y. Zhang
- den Förderern und dem Projektträger



9. Projektstatusgespräch zu BMBF/BMWi-geförderten FuE-Vorhaben auf dem Gebiet der Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen

Zerstörungsfreie in situ-Permeabilitätsmessung

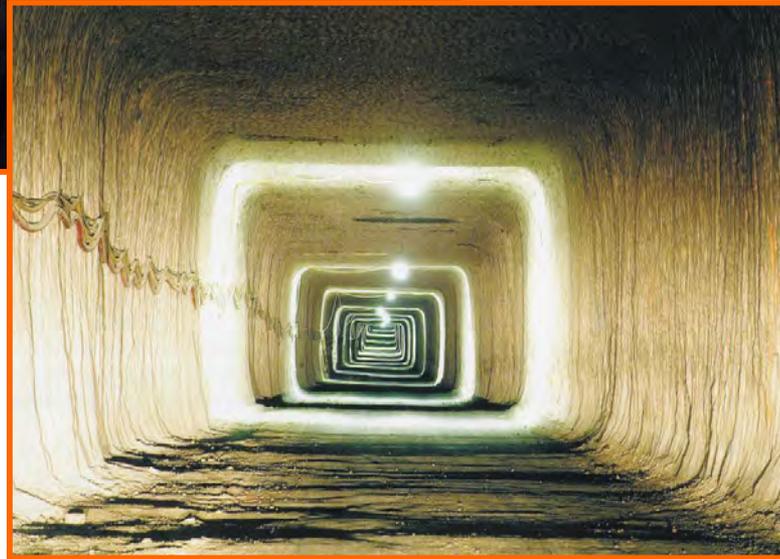
(Förderkennzeichen: 02E10447)

H.-D. Voigt
Inst. für Bohrtechnik und Fluidbergbau
TU Bergakademie Freiberg

F. Grafe
IBeWa

Th. Wilsnack
IBeWa

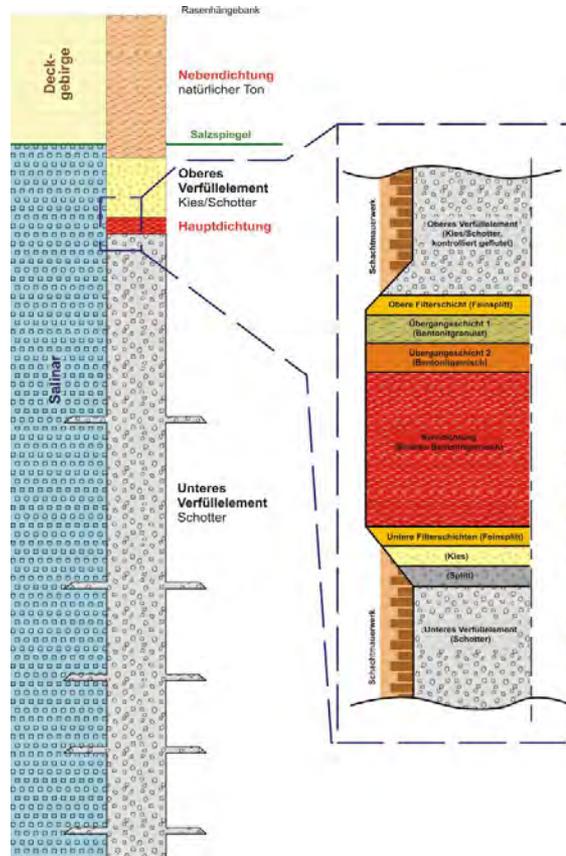




GTS, 2005



Schächte



Strecken



Auflockerung durch Auffahrung Auflockerung durch Veränderung der Gebirgsspannung
 Auflockerung durch chemische Verwitterung

„verlorener“ Sensor

Oberflächenpacker

Sachverhalt

Auflockerungszone

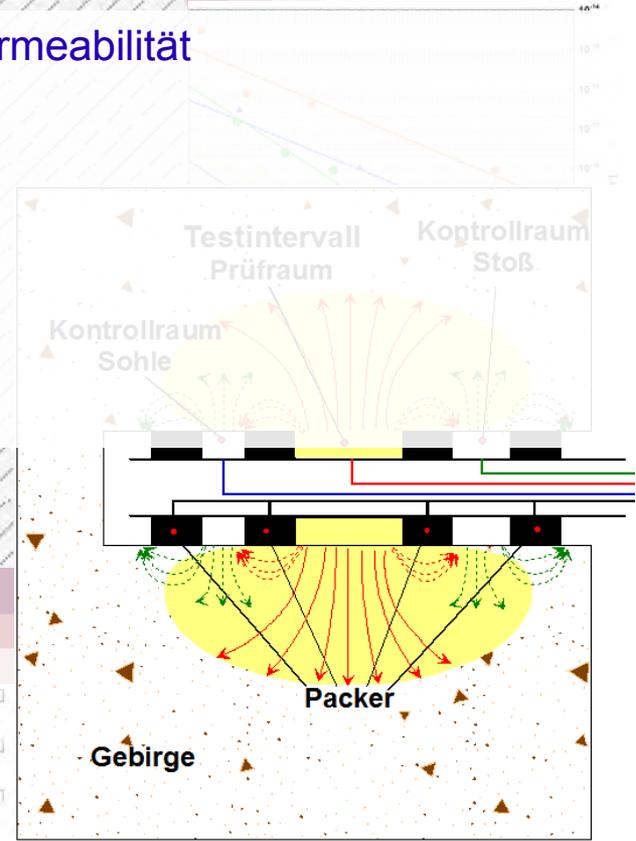
1. Schwerpunkt: Ermittlung der konturnahen Permeabilität

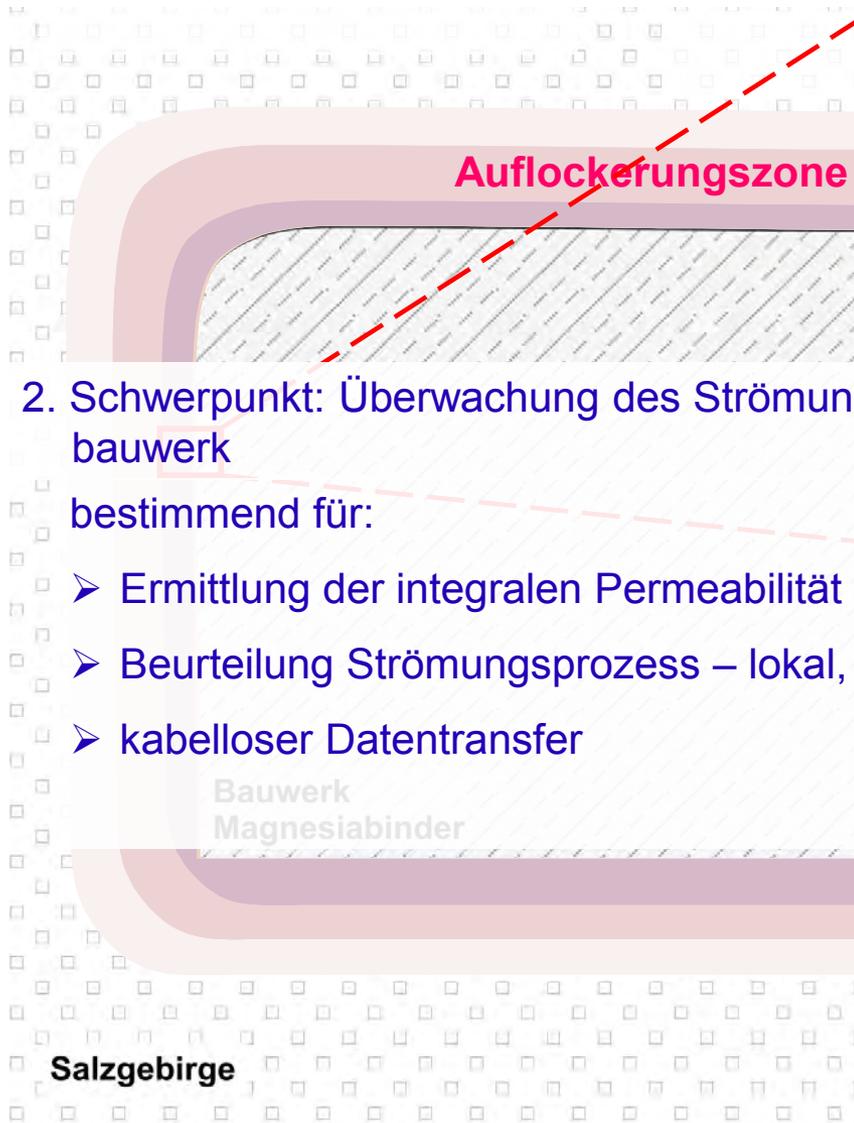
bestimmend für:

- Bauwerkskonzept
- Dimensionierung
- Gebirgsnachschnitt

Bauwerk
Magnesiabinder

Salzgebirge

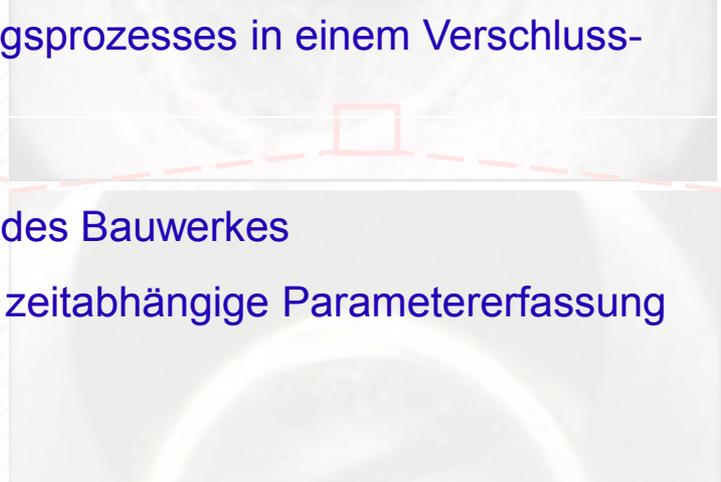




2. Schwerpunkt: Überwachung des Strömungsprozesses in einem Verschlussbauwerk

bestimmend für:

- Ermittlung der integralen Permeabilität des Bauwerkes
- Beurteilung Strömungsprozess – lokal, zeitabhängige Parametererfassung
- kabelloser Datentransfer



Andere Anwendungen

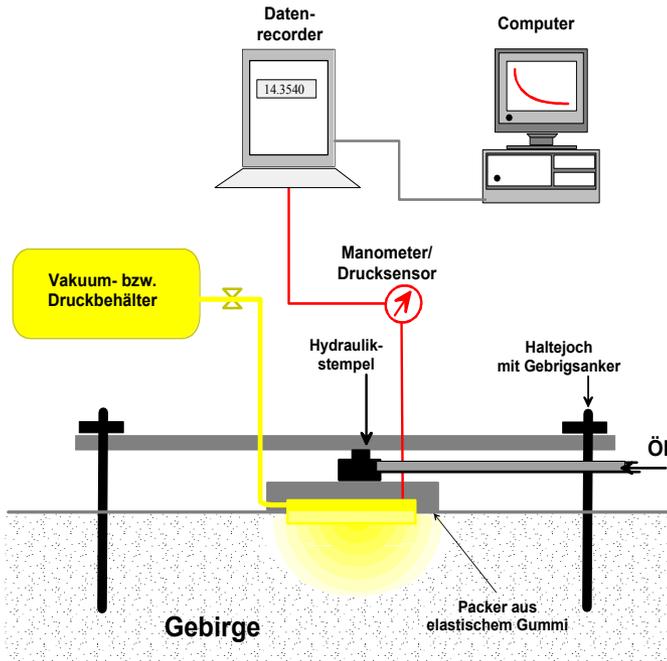
in situ/laborative Messungen mit Oberflächenpacker:

- Permeabilität von Baustoffoberflächen → Aussagen zu Korrosionsvorgängen
- Permeabilität von Beschichtungen, Oberflächenbehandlungen

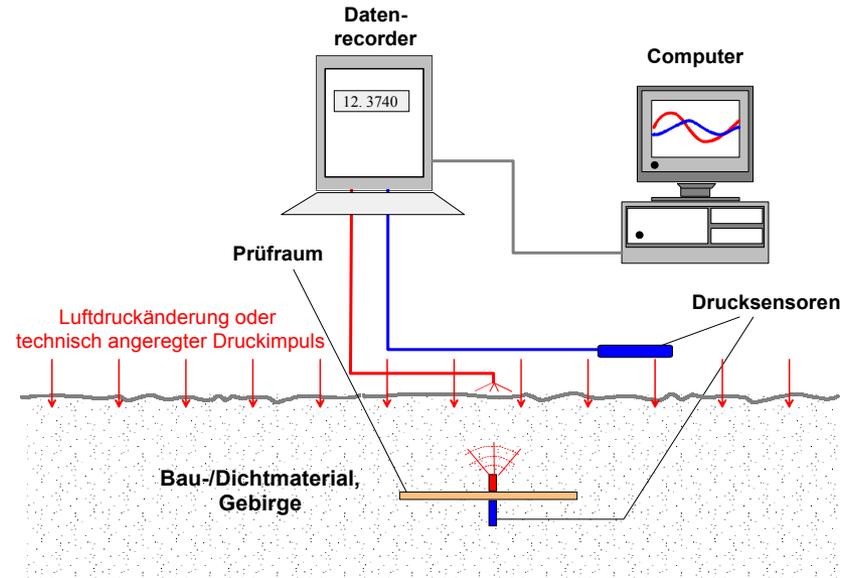
in situ Messungen mit „verlorener“ Sensor:

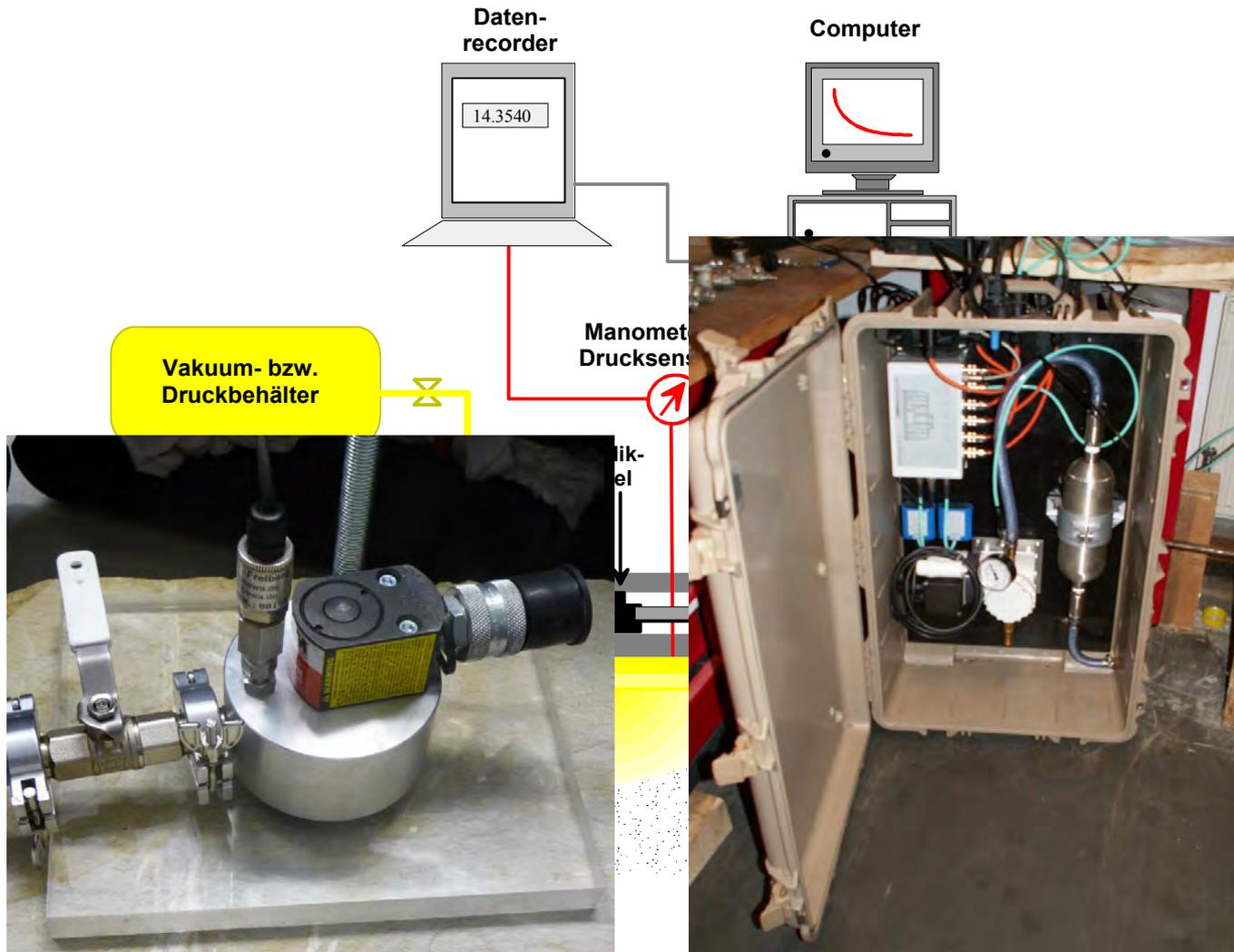
- Deponie Abdeckungen
- Eindringprozesse in Bauwerke (Korrosion)
- Prozessüberwachung (Monitoring)

1. Oberflächenpacker



2. „verlorener“ (kabelloser) Sensor





Konturvorbereitung – Glätten der Oberfläche



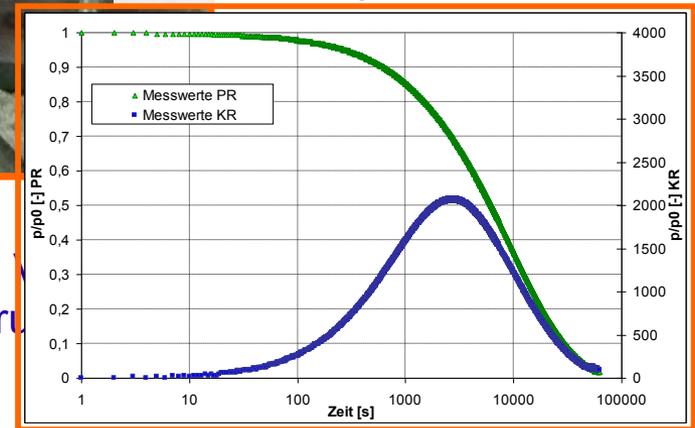
Messung



Messergebnisse

Versuchsregime

- Impulstest (Überdruck, ...)
- Test mit konstantem Druck



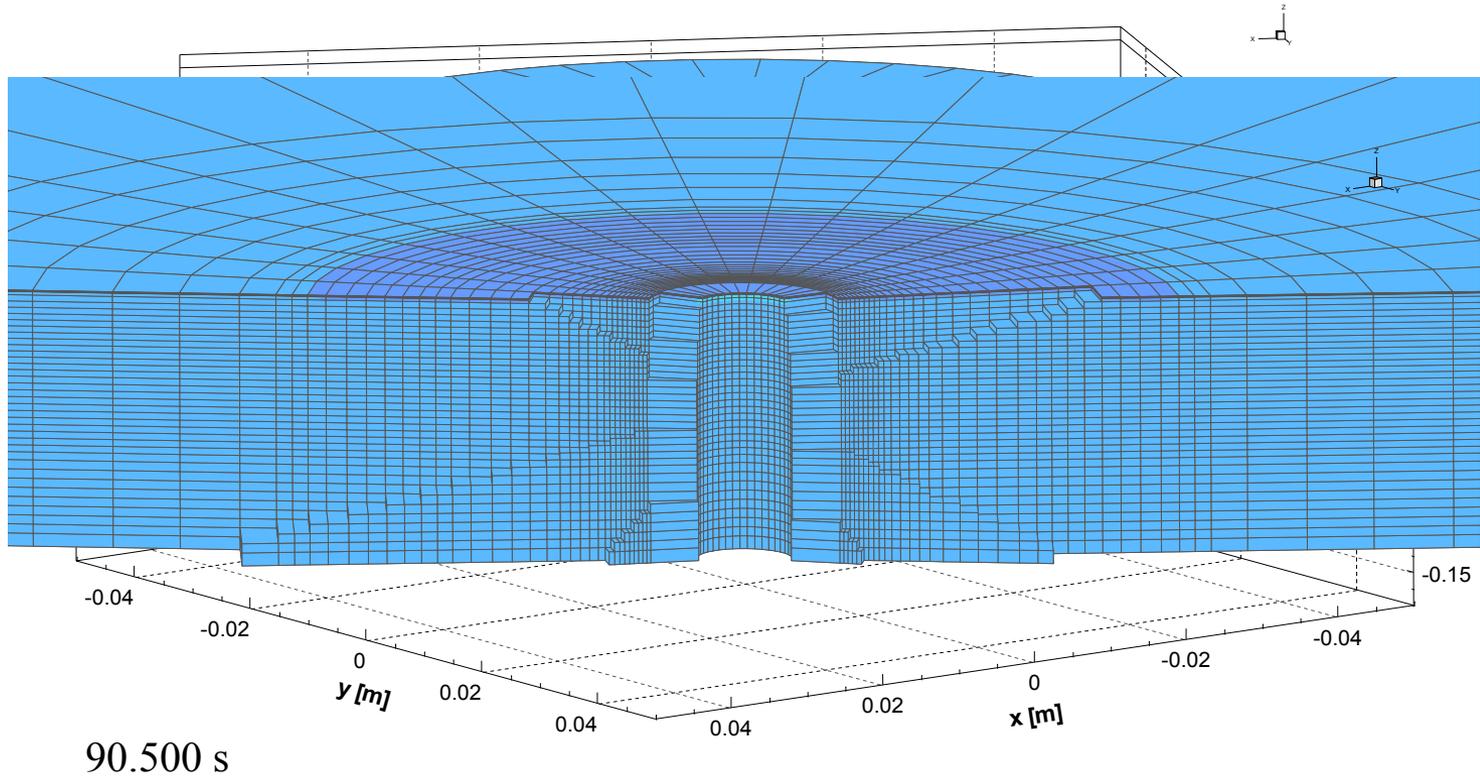
Auswertung

Programmsystem ModOFF, r- ϕ -z Geometrie

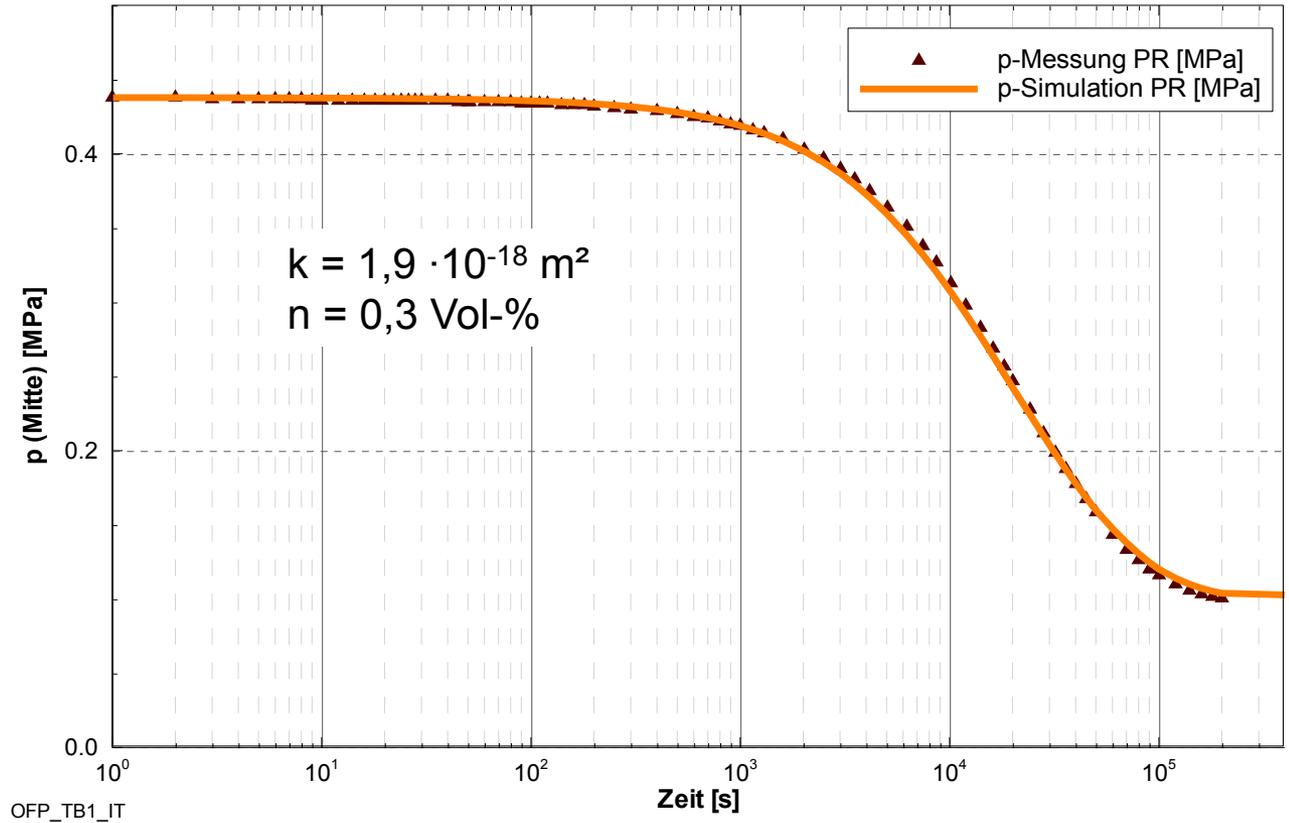
„verlorener“ Sensor

Oberflächenpacker

Sachverhalt



Auswertung - Magnesiabinder



Funktionsnachweis/Test Oberflächenpacker

Dichtheitsnachweis

Referenzuntersuchungen Magnesiabinder - Labor

Sandstein - Labor

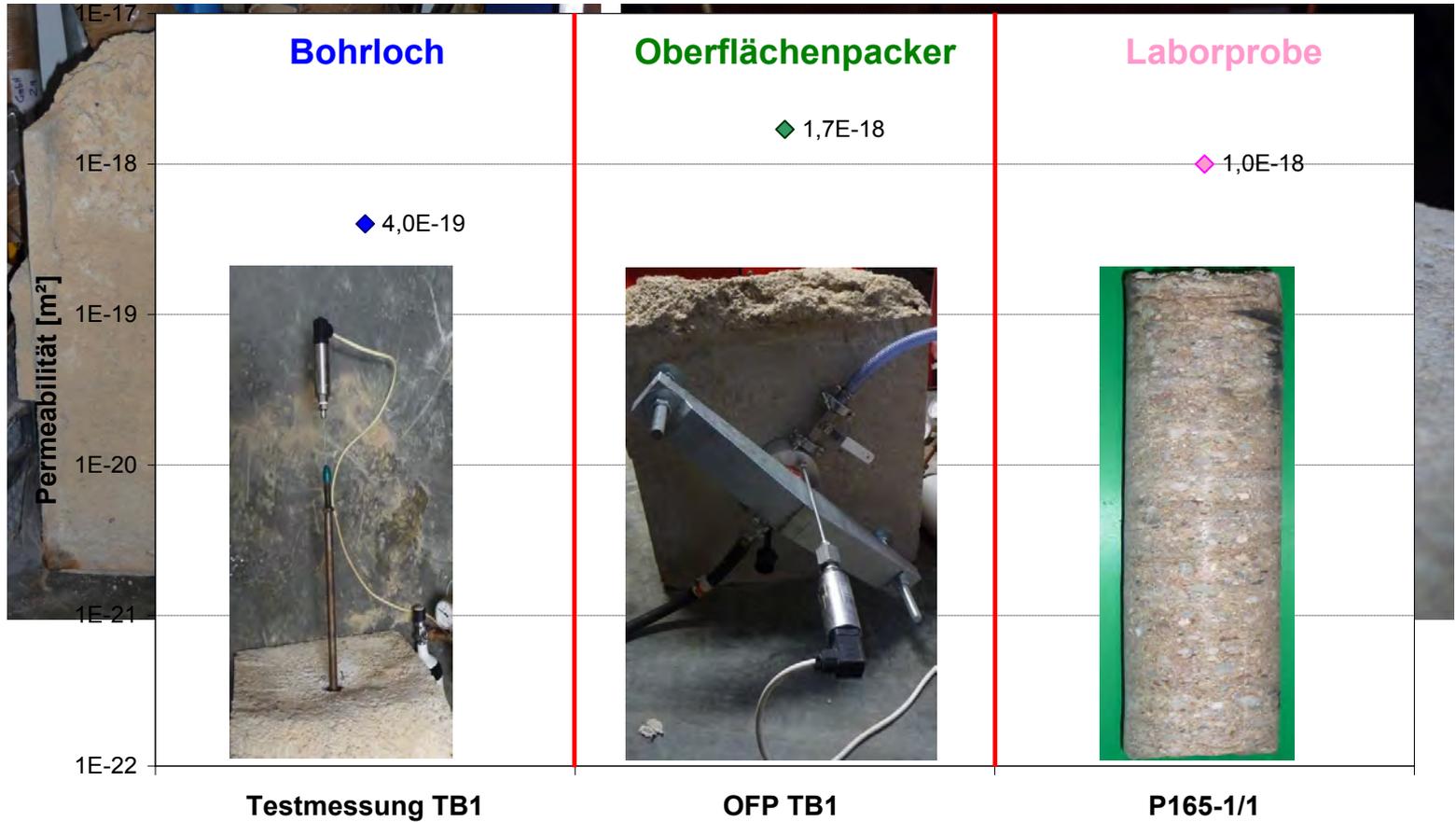
Steinsalz - in situ

Untersuchungen zum Einfluss der Oberflächenvorbereitung

Magnesiabinder

„verlorener“ Sensor
Oberflächenpacker

Sachverhalt

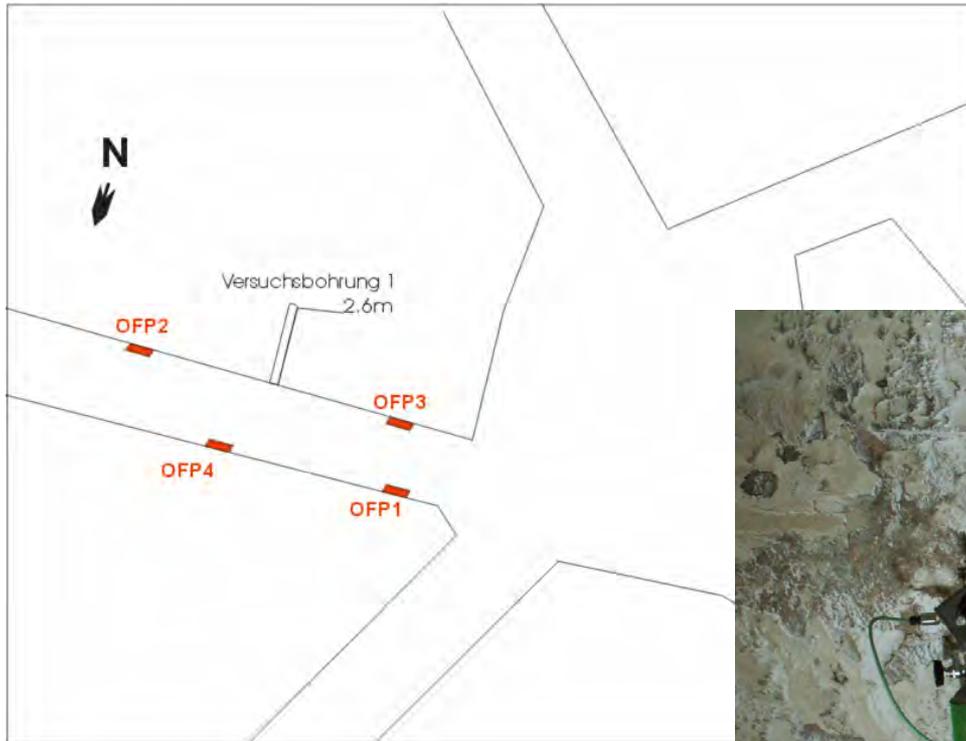


In situ-Messungen Steinsalz

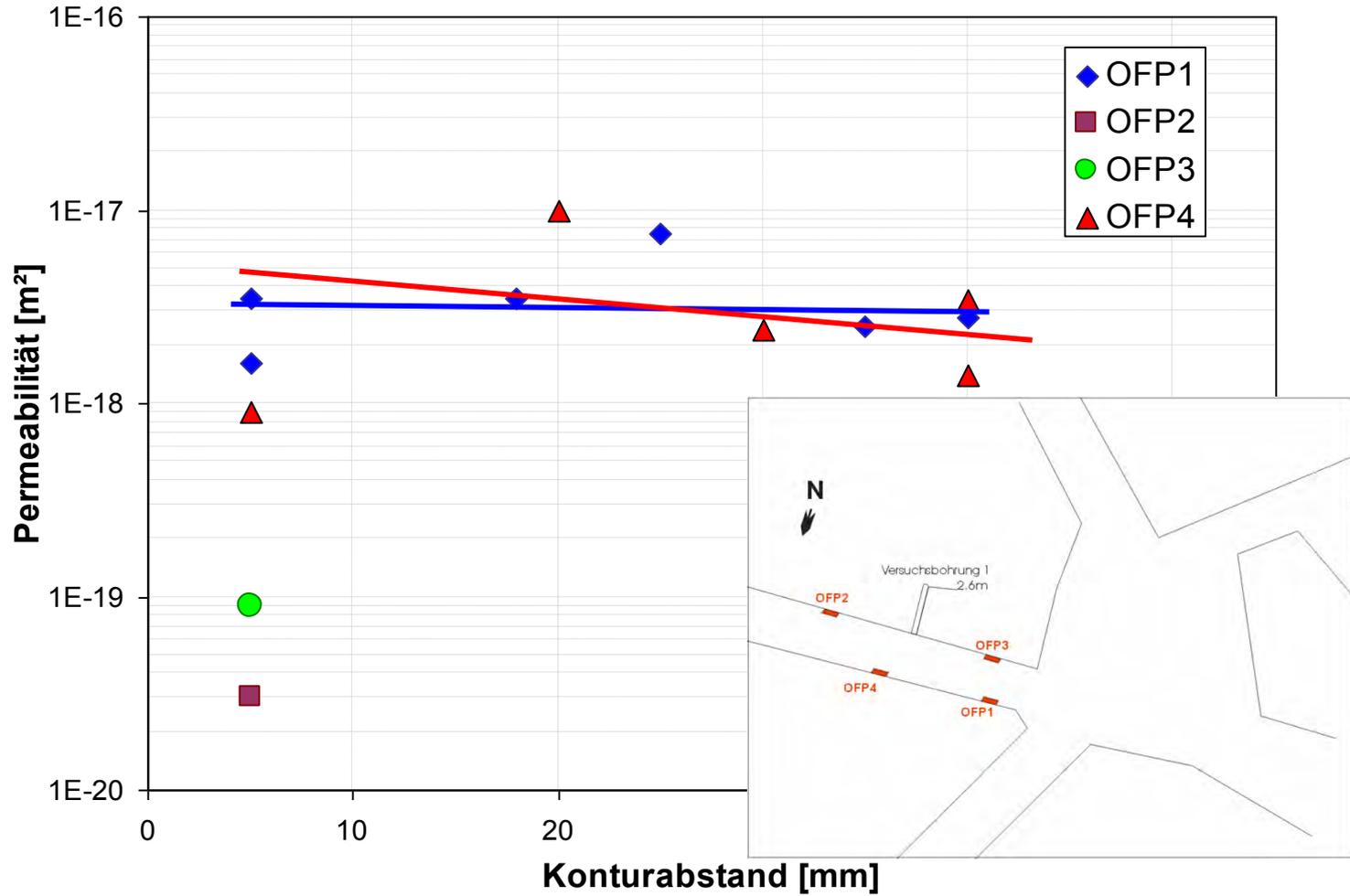
„verlorener“ Sensor

Oberflächenpacker

Sachverhalt

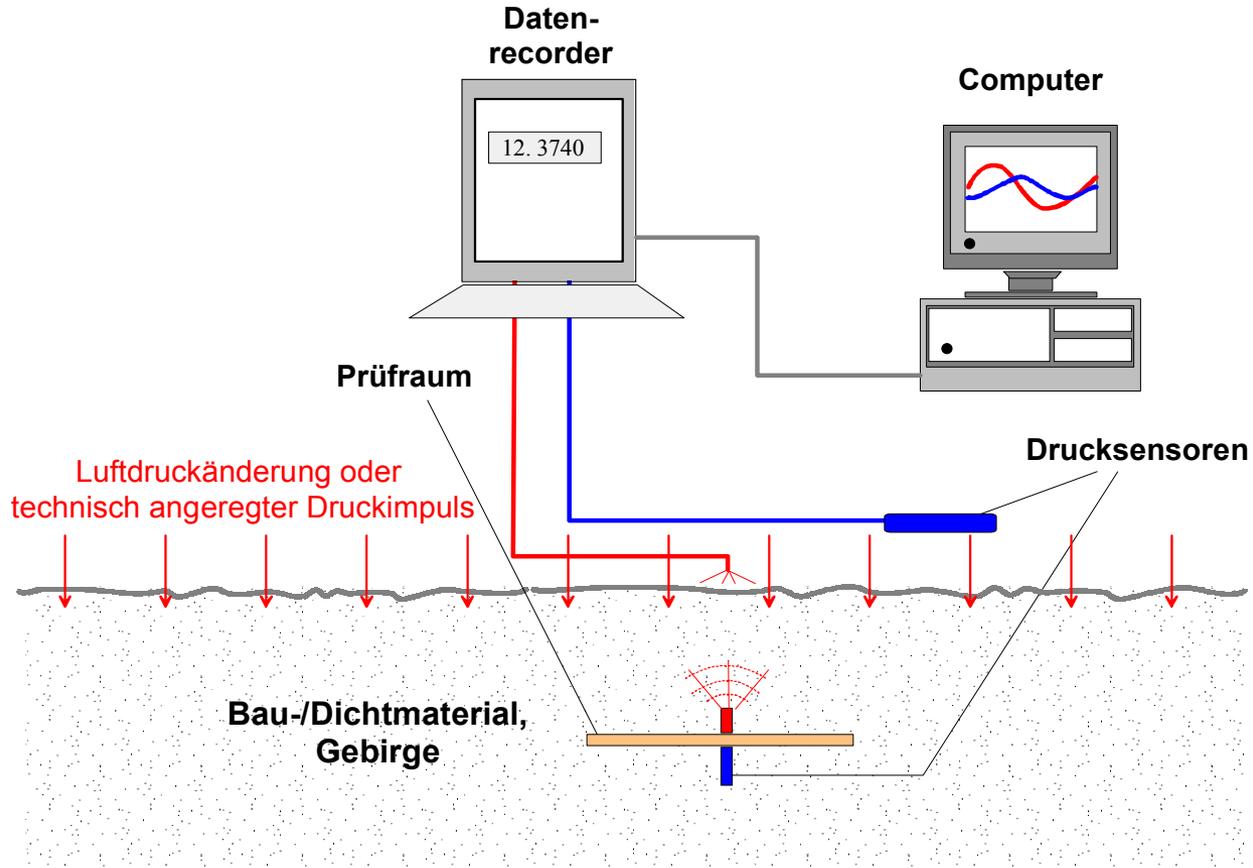


In situ-Messungen Steinsalz



Zusammenfassung Oberflächenpacker

- Oberflächenpacker ermöglicht laborativ und in situ die Ermittlung der Permeabilität der Material- bzw. Konturoberfläche
- unterschiedliche Messkonfigurationen ermöglichen die Ermittlung von Permeabilitäten über einen großen Wertebereich
- in Abhängigkeit von der Oberflächenbeschaffenheit ist ggf. Glättung erforderlich
- unterschiedliche Schleiftiefen ermöglichen tiefendifferenzierte Aussagen
- Einsatz des Messverfahrens zur Standorterkundung ist in Vorbereitung



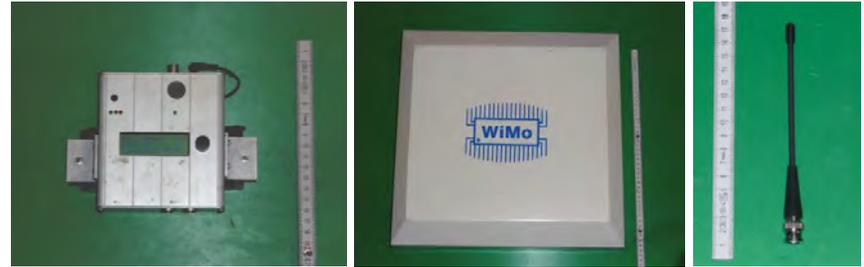
Prämissen

- trocknes Steinsalz besitzt geringe elektrische Leitfähigkeit → hohe Reichweiten
- niedrige Frequenzen → hohe Reichweiten
- Einfluss Lösungssättigung im Porenraum → Erhöhung der Dämpfung → Reduzierung der Reichweite

Gehäuse: korrosionsbeständiger
Edelstahl/Kunststoff
Stromversorgung: Lithiumbatterien
Sensoren: p + T



Signalübertragung
Industriefunksignal im lizenzfreien
ISM-Band 433 MHz
Stab- und/oder Richtfunkantenne



Konfiguration muss in jedem Fall an die Messaufgabe angepasst werden !

Funktionsnachweis/Test „verlorener“ Sensor

Gebirge	Versuchsort	Ergebnis
Kaliflöz-Staßfurt (K2)	Grube Teutschenthal	Distanzen bis 100 m
Werra-Steinsalz (Na1)	Grube Merkers	Distanzen bis 200 m
Freiberger Kerngneis (PR3F)	Freiberg Grube Reiche Zeche	Distanzen bis 3 m
Erdreich	Freiberg	Versuch läuft



Zusammenfassung „verlorener“ Sensor

- kabellose Datenübertragung ist prinzipiell möglich
- Reichweite ist standortabhängig – Gestein, Geologie, Feuchtigkeit–
erfolgreiche Reichweitentests bis 200 m
- standortbezogene Konfiguration erforderlich
- Test einer Datenübertragung in einem Verschlussbauwerk steht noch aus
→ großtechnischer Versuch in Vorbereitung

Danke!

Dem Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie als Fördermittelgeber und dem Projektträger Karlsruher Institut für Technologie für die Ermöglichung des Vorhabens, die finanzielle und mentale Unterstützung sowie die immer schnelle und unkomplizierte Hilfe.

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit und Geduld.

Glück auf !

**Eignungsuntersuchung von Bentonit/Sand-Gemischen als
Verschlussmaterial im Tonendlager**

Tilmann Rothfuchs, Rüdiger Mieke

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH

1 Einleitung

Viele Konzepte zur Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in geologischen Formationen sehen im Hinblick auf den sicheren Einschluss der Abfälle die Verwendung von hoch kompaktiertem Bentonit als Puffermaterial (Buffer) zwischen Abfallbehälter und Wirtsgestein vor. Im Jahre 2000 begann die GRS ergänzend hierzu moderat kompaktierte Ton/Sand-Mischungen als alternatives Verschlussmaterial zu untersuchen [1], da derartige Materialmischungen möglicherweise eine geeignete Alternative insbesondere für den Verschluss gasführender Endlagerbereiche darstellen können.

Im Vergleich zu hoch kompaktiertem Dichtmaterial weisen Ton/Sand-Mischungen im ungesättigten Zustand eine hohe Gaspermeabilität und einen vergleichsweise niedrigen Gaseintrittsdruck im gesättigten Zustand auf, wobei gleichzeitig ein ausreichendes Selbstabdichtungspotenzial aufgrund der Quellung des Tons bedingt durch die Wasseraufnahme aus dem Wirtsgestein gegeben ist. Durch die Auswahl optimierter Materialmischungen kann eine unerwünschte Ausbildung hoher Gasdrücke im Nahfeld des Einlagerungsbereichs infolge Korrosionsgasbildung vermieden werden. Die mögliche Migration von Radionukliden aus der Abfallmatrix in der flüssigen Phase durch den aufgesättigten Buffer wird, wie auch im Wirtsgestein, diffusionsgesteuert und damit vergleichsweise langsam erfolgen.

Zur Bestimmung geeigneter Materialmischungen wurden zunächst Untersuchungen im geowissenschaftlichen Labor der GRS in Braunschweig durchgeführt. Seit 2004

werden weitere Untersuchungen zur Verifizierung des Materialverhaltens unter In situ-Bedingungen z. Zt. noch anhaltend im Mont Terri Untertagelabor (MTRL) in der Schweiz im Rahmen des SB-Experiments (Selfsealing Barriers of Clay/Sand Mixtures) vorgenommen.

In Endlagern in Tonformationen kann das körnige Dichtmaterial als Buffer und/oder als abdichtender Versatz in Einlagerungsbohrlöchern wie auch in Strecken eingesetzt werden (siehe Abb. 1-1), wobei das Material mit geringer Verdichtung eingebaut wird.

2 Ziel des SB-Experiments

Das Ziel des SB-Experiments besteht darin zu belegen, dass die Dichteigenschaften von Ton/Sand-Gemischen, die zuvor im GRS-Labor untersucht wurden, auch unter endlagerrelevanten In-situ-Bedingungen technisch realisiert und nachgewiesen werden können.

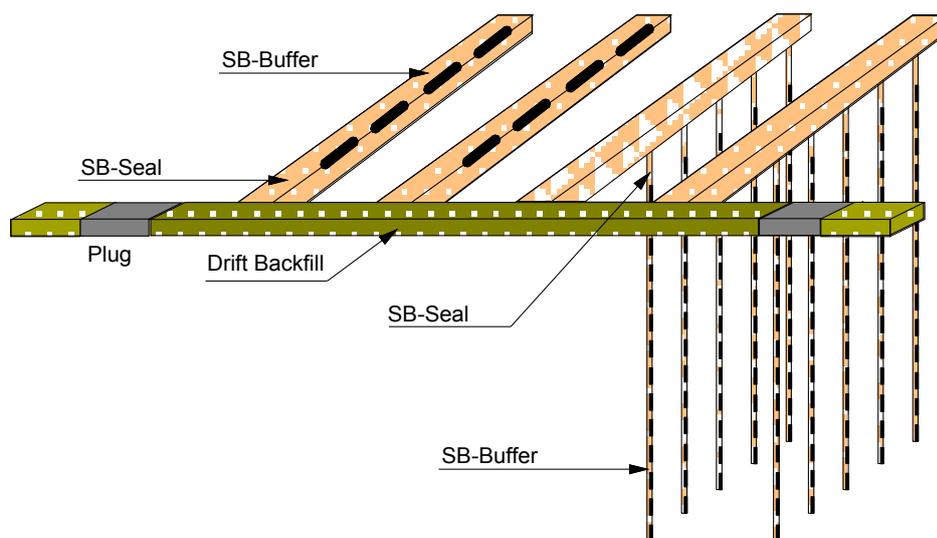


Abb. 2-1 Einsatzmöglichkeiten des SB-Materials als Dichtung, Buffer und Versatz

Die wichtigsten Materialeigenschaften, die zur Sicherstellung der geforderten Dichteigenschaften erfüllt sein müssen, sind im Folgenden aufgeführt:

Gaspermeabilität

Das Dichtmaterial sollte eine hohe Gaspermeabilität aufweisen, um die Entwicklung hoher Gasdrücke aufgrund von Korroisongasbildung im Endlagernahfeld durch Migration der Gase durch das Dichtmaterial zu verhindern. Unmittelbar nach dem Einbau des Dichtmaterials liegt die Gaspermeabilität im ungesättigten Zustand zwischen $1\text{E-}13$ und $1\text{E-}15\text{ m}^2$. Nach dem Gasdurchbruch im gesättigten Zustand verbleibt eine Gaspermeabilität von über $1\text{E-}18\text{ m}^2$.

Wasserpermeabilität

Die Wasserpermeabilität des Dichtmaterials sollte niedrig sein. Durch Wasseraufnahme aus dem Gebirge verringert sich die Wasserpermeabilität aufgrund von Quellung, wobei von einer weiteren Reduzierung bedingt durch das Kriechen des Gebirges mit einer Verheilung der Auflockerungszone ausgegangen werden kann. Eine Ausgangswasserpermeabilität von ca. $1\text{E-}18$ bis $1\text{E-}17\text{ m}^2$ wird als ausreichend angesehen in Analogie zur Permeabilität der Auflockerungszone (EDZ) [2].

Gaseintritts-/Gasdurchbruchdruck

Damit das Dichtmaterial als eine Art Ventil wirkt, muss der Gaseintrittsdruck niedriger als der des Wirtsgesteins sein, um eine bevorzugte Gasmigration über die Dichtung zu provozieren.

Gemäß NAGRA Technical Report 02-06 [3], liegt der Gaseintrittsdruck im ungestörten Opalinuston in 600 m Tiefe bei ca 5 MPa. Folglich muss der Gaseintrittsdruck des Dichtmaterials unter diesen Bedingungen unterhalb dieses Wertes liegen. Die Bedingungen im MTRL unterscheiden sich hiervon deutlich. Nach Thury et al. [4] weist der Überlagerungsdruck eine vertikale Spannung von 7.25 MPa mit einer horizontalen minimalen Spannungskomponente von 2 MPa auf. Der Porenwasserdruck beläuft sich ebenfalls auf nur 2 MPa, so dass der Gaseintrittsdruck des Dichtungsmaterials beim SB-Experiment auch unterhalb des Mont Terri spezifischen Werts von 2 MPa liegen muss. Dieser Wert wäre konservativ, wenn es gelänge, die notwendige Abdichteffizienz von $1\text{E-}18\text{ m}^2$ gegenüber Wasser auch unter den im MTRL vorliegenden In-situ-Bedingungen nachzuweisen.

Quelldruckeigenschaften

Zur Gewährleistung der Abdichtung gegenüber zufließendem Formationswasser ist ein ausreichender Quelldruck notwendig. Bei Zutritt von Wasser kommt es aufgrund der Quellung zu einer Selbstabdichtung und das Material füllt den Raum zwischen den Abfallbehältern und den Streckenstößen vollständig aus. Laboruntersuchungen haben gezeigt, dass das Eindringen von Gas in einen mit Wasser gesättigten Ton-Buffer nur auftritt, wenn der Gasdruck etwas über der Summe des Quelldrucks und des Porenwasserdrucks liegt [4]. Da der Gasfluss bevorzugt über die Dichtung und nicht in das Wirtsgestein hinein erfolgen soll, darf der Gaseintrittsdruck der Dichtung den des Gebirges nicht überschreiten. Eine Voraussetzung dafür ist, dass der Quelldruck der Dichtung den Gaseintrittsdruck des Gebirges nicht übersteigt.

2.1 Untersuchungsprogramm des SB-Vorhabens

Die Durchführung des SB-Vorhabens umfasst drei Phasen:

1. Laboruntersuchungen zur Festlegung geeigneter Materialmischungen, Ermittlung der hydraulischen Parameter und Entwicklung geeigneter Einbaumethoden zur Erzielung der erforderlichen Einbaudichten.
2. Großmaßstäbliche Laboruntersuchungen (Technikumsversuche) zur Entwicklung der Einbautechnik und zur Ermittlung der Aufsättigungsdauer unter Laborbedingungen.
3. Untersuchungen in Bohrlöchern im Untertagelabor Mont Terri unter repräsentativen In situ-Bedingungen.

2.1.1 Laboruntersuchungen

Die Dichteigenschaften von Ton/Sand-Mischungen wurden zunächst in den Vorhaben „Zweiphasenfluss-Projekt“ [5] und KENTON [1] untersucht, wobei der Schwerpunkt auf den Ein- und Zweiphasenfluss-Eigenschaften lag. Die Messungen erfolgten an Ton/Sandmischungen mit einem Tonanteil von 10 %, 25 % und 50 %. Der Messaufbau ist in der Abb. 2-2 dargestellt.

Die Untersuchungen des 2-Phasenfluss- und des KENTON-Projekts haben ergeben, dass die einphasigen Gaspermeabilitäten nur geringfügig vom Tongehalt abhängen.



Abb. 2-2 Versuchsaufbau zur Ermittlung der hydraulischen Parameter des SB-Materials

Die Gaspermeabilitäten für die Proben mit 10 % und 25 % Tonanteil lagen im Bereich von $1.3E-13$ und $3.8E-13 \text{ m}^2$. Bei einem Tongehalt von 50% ergab sich eine mit $2.3E-13 - 1.2E-12 \text{ m}^2$ etwas höhere Gaspermeabilität. Die einphasigen Wasserpermeabilitäten wurden hingegen erheblich vom Tongehalt beeinflusst.

Die Wasserpermeabilitäten betragen $2.9E-13 - 5.3E-13 \text{ m}^2$ (10% Ton), $1.2E-16 - 5.3E-15 \text{ m}^2$ (25% Ton) und $< 1E-22 \text{ m}^2$ bei den Proben mit 50 % Ton.

Der Gasdurchbruchsdruck variierte für die Proben mit 10 % und 25 % Ton zwischen 0.02 und 0.05 MPa. Für die Probe mit 50 % Ton war lediglich ein Wert zu ermitteln, der bei ca. 0.05 MPa lag.

Aufbauend auf den beiden Vorgängerprojekten wurde im SB-Vorhaben ein Laborprogramm zur Optimierung der Dichtmaterialien durchgeführt, wobei Ton/Sand-Mischungen mit einem Tonanteil von 35 %, 50 % und 70 % zur Auswahl kamen. Bei den einzelnen Komponenten handelt es sich um Calcigelpulver und um einfachen Bausand [6].

In Tabelle 2.1 sind die im Labor ermittelten Ergebnisse mit ihren Mittelwerten (in Klammern) aufgeführt und den in Abschnitt 2 aufgezeigten Anforderungen gegenüber gestellt. Die Gegenüberstellung zeigt, dass die Mischungen mit 35 %Ton und 50 %Ton die Anforderungen am besten erfüllen. Aufgrund der Ergebnisse der Proben mit dem geringeren Tonanteil kann davon ausgegangen werden, dass die Mischungen mit 70 %Ton zu höheren Quelldrücken und Gasdurchbruchsdrücken, als erwünscht, führen. Aus diesem Grund wurden für die weiteren Untersuchungen des SB-Vorhabens die Mischungen 35/65 und 50/50 ausgewählt.

Tab. 2.1 Gegenüberstellung von gemessenen Parameterwerten und Anforderungen (Mittelwerte in Klammern)

Gemessene Parameter unter Einbaubedingungen					
	Gaspermeabilität (trocken)	Ausgangswasserpermeabilität bei Vollsättigung	Gaseintritts-/Gasdurchbruchsdruck	Gaspermeabilität nach Gasdurchbruch	Quell- druck
Probe	m ²	m ²	MPa	m ²	MPa
35/65	1.2E-13	3.3E-17 - 9E-18 (5.2E-18)	0.4 - 1.1 (0.75)	1.1E-17 - 1.6E-17 (1.4E-17)	0.2 - 0.4 (0.28)
50/50	7.5E-14	1.1E-18 - 4.3E-18 (2.2E-18)	0.4 - 2.8 (1.83)	5.5E-18 - 6.2E-18 (5,9E-18)	0.3 - 0.5 (0.35)
70/30	1.2E-15	5.5E-19	1	n.d.	0.4-?
Anforderungen					
	Gaspermeabilität (trocken)	Ausgangswasserpermeabilität bei Vollsättigung	Gaseintritts-/Gasdurchbruchsdruck	Gaspermeabilität nach Gasdurchbruch	Quell- druck
	hoch	1E-17 - 1E-18	< 2	hoch	< 2

2.1.2 Großmaßstäblicher Laborversuch (Mock Up-Test)

Vor Beginn der In-situ-Experimente wurden aufbauend auf den Labormessungen zunächst Untersuchungen im Maßstab 1:1 im GRS-Labor in Braunschweig in Stahlrohren vorgenommen. Der grundsätzliche Aufbau ist in der Abb. 2-3 dargestellt. Die gesamte Länge des Testrohrs beträgt 2.5 m mit einem Innendurchmesser von 0.31 m. Das Dichtungsmaterial wurde auf 1 m Länge in Schichten von ca. 5 bis 10 cm eingebracht, wie es auch für den In-situ-Aufbau vorgesehen war.

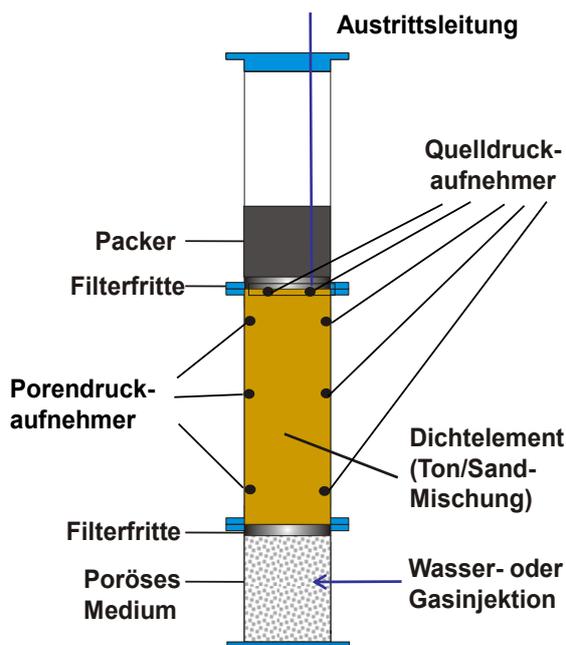


Abb. 2-3 Prinzipieller Aufbau der großmaßstäblichen Laborversuche (Mockup-Tests) (links), Einbau des Packers (rechts)

Unterhalb des Dichtkörpers befindet sich eine Fluidinjektionskammer, die mit einem porösen Medium zur Volumensverringern gefüllt war. Über diese Kammer erfolgt die Wasserinjektion zur Aufsättigung wie auch die Gasinjektion nach Aufsättigung zur Bestimmung der verbleibenden Gaspermeabilität. Oberhalb des Dichtelements wurde ein Packer installiert, der zusätzlich mit einer Quertraverse gegen ein Herausdrücken gesichert wurde. Unterhalb des Packers befinden sich zwei Quelldruckaufnehmer. Zur Kontrolle des Versuchsablaufs sind zwischen Rohrwand und Dichtelement gleichmäßig in drei Ebenen Sensoren zur Erfassung von Quelldruck und Porendruck installiert.

Die Ziele des Mock Up-Tests waren folgendermaßen definiert:

- Entwicklung und Überprüfung der Misch- und Einbautechnik,
- Ermittlung der Aufsättigungsdauer,
- Ermittlung der Gas- und Wasserpermeabilitäten sowie des Gaseintritts-/Gasdurchbruchdrucks im gesättigtem Zustand,
- Überprüfung der Sensoren nach Ausbau am Versuchsende.

Nach dem Einbau des Dichtmaterials wurde zunächst die Ausgangsgaspermeabilität ermittelt, die einen Wert von $6.5E-14 \text{ m}^2$ ergab. Anschließend erfolgte die Aufsättigung

der Dichtung mit einem Injektionsdruck von 1.1 MPa. Nach einer Injektionszeit von ca. 18 Monaten stellte sich im mittleren Bereich der Dichtung ein Gesamtdruck von ca. 1.1 MPa ein, was nahezu dem Injektionsdruck entsprach. Im oberen Bereich war hingegen kein vergleichbares Verhalten festzustellen. Hier ergab sich bis zum Ende der Aufsättigungsphase ein Gesamtdruck von 0.25 und 0.35 MPa. Der derzeitige Gesamtdruck beträgt ca. 0.27 und 0.33 MPa (Abb. 2-4).

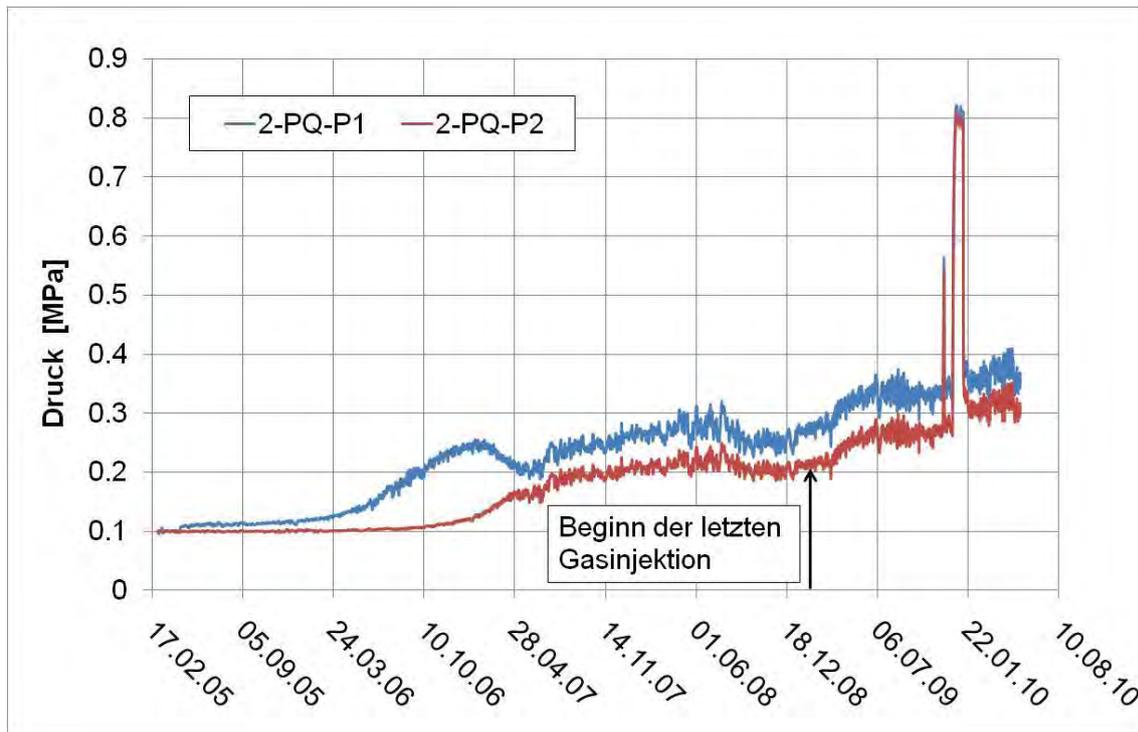


Abb. 2-4 Mock Up-Test: Gesamtdruck an der Packerunterseite

Nach ca. 27 Monaten war ein Wasseraustritt am Dichtungsende zu beobachten. Nachdem sich stationäre Fließbedingungen eingestellt hatten, wurde die initiale Wasserpermeabilität zu $1.4E-18 \text{ m}^2$ bestimmt. Danach wurde die Wasserinjektion beendet und der Druck in der Dichtung abgebaut. Insgesamt wurden von der Dichtung 28.4 l Wasser aufgenommen. Nachdem sich der Druck im Dichtkörper bis auf den verbleibenden Quelldruck von etwa 0.25 MPa abgebaut hatte, wurde mit der abschließenden Gasinjektion zur Bestimmung des Gaseintrittsdrucks durch stufenweise Erhöhung des Gasinjektionsdrucks begonnen. In der Abb. 2-5 ist der Verlauf des Gasinjektionsdrucks und der verdrängten Wassermenge über die Versuchszeit nach Beginn der Gaseintritts bzw. -durchbruchmessungen dargestellt.

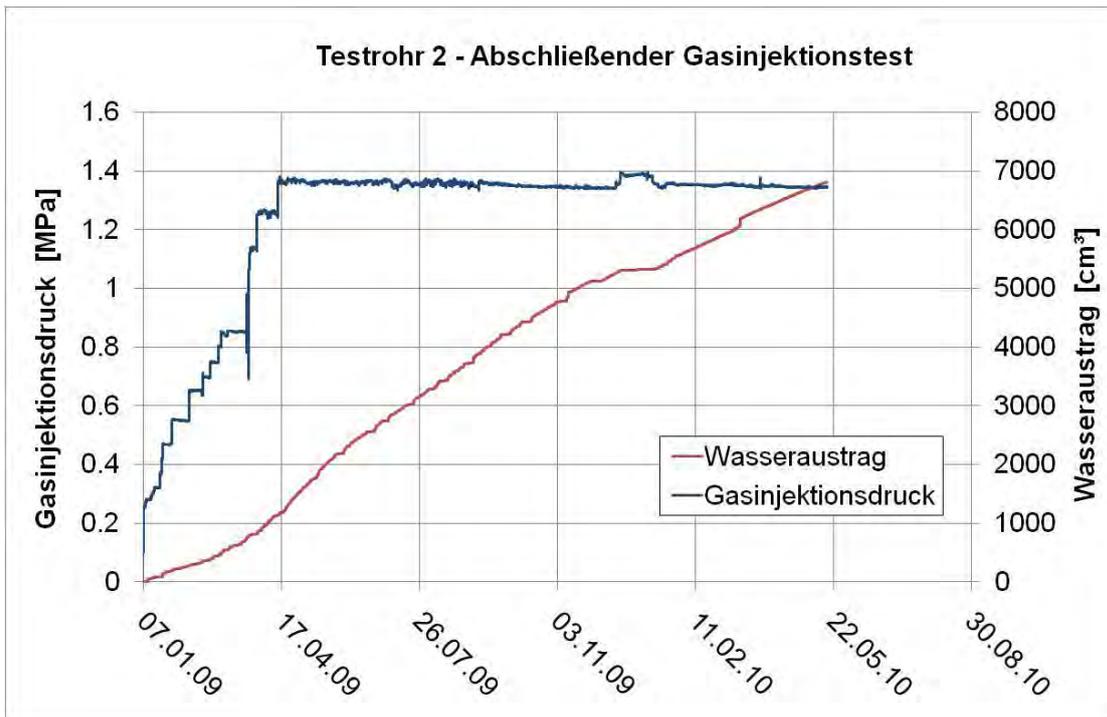


Abb. 2-5 Gasinjektionsdruck und Wasseraustrag während der abschließenden Gasinjektion im Mock Up-Test

Aus dieser Abbildung wird deutlich, dass der Gaseintritt unmittelbar nach Beginn der Gasinjektion bereits bei einem Druck von 0.25 MPa mit begleitendem Wasseraustrag erfolgte. Ca. 325 Tagen nach Beginn der abschließenden Gasinjektion war ein erster Gasaustritt an der Oberseite des Dichtelements festzustellen, der zunächst durch zufließende Lösung in der Dichtung immer wieder unterbrochen wurde. Seit Mitte März 2010 war ein kontinuierlicher Gasfluss messbar, so dass die Bestimmung der Fließrate mittels Massenflussmesser erfolgen konnte. Diese Ergebnisse sind in der Abb. 2-6 dargestellt. Die Schwankungen im zeitlichen Verlauf der Fließrate sind auf eine weiterhin bestehende Mobilisierung der Lösung in der Dichtung, die sich auf den Gasfluss auswirkt, zurückzuführen. Insgesamt ist ein stetiger Anstieg der Gasfließrate festzustellen. Unter Berücksichtigung der zuletzt ermittelten Gasfließrate und errechnet sich die Permeabilität für Gas zu $2.3E-18 \text{ m}^2$. Hierbei ist zu beachten, dass noch keine konstante Gasfließrate vorliegt, so dass es sich bei dem obigen Wert noch um eine Abschätzung handelt. Es ist aber davon auszugehen, dass sich der Wert für die Gaspermeabilität noch erhöht und sich somit den an Laborproben nach Gasdurchbruch ermittelten Werten annähern wird.



Abb. 2-6 Entwicklung der Gasfließrate nach Eintreten eines kontinuierlichen Gasflusses nach Gasdurchbruch

Ende November 2009 wurde das Dichtelement aus versuchstechnischen Gründen am Ausgangsende über ein Wochenende eingeschlossen. An der Gaseintrittsseite lag dabei weiterhin der Injektionsdruck an. Über diesen Zeitraum war ein deutlicher Anstieg des Gesamtdrucks im Dichtelement unterhalb des Packers zu verzeichnen (siehe Abb. 2-4). Nach Öffnen der ausgangsseitigen Leitungen sank der Druck wieder auf das vorherige Niveau ab. Über Weihnachten wurde die Dichtung erneut sowohl an der Injektionsseite als auch an der Ausgangsseite eingeschlossen. Auch hier ist ein starker Anstieg der Drücke unterhalb des Packers zu verzeichnen. Der höhere Anstieg ist auf die längere Einschlusszeit zurückzuführen. Auch hier stellt sich der Druck nach Öffnen der Zu- und Ableitungen wieder auf das ursprüngliche Niveau vor dem Einschließen ein. Diese Beobachtung weist eindeutig auf die bestehende hydraulische Verbindung über die Dichtelementlänge hin, die durch den kurz danach eingetretenen Gasdurchbruch auch bestätigt wurde. Unter diesen Umständen lässt sich zusammenfassend feststellen, dass die im Mock Up-Test verwendete Ton/Sand-Mischung 35/65 den in Tabelle 2.1 aufgeführten Anforderungen in vollem Umfang entspricht und die geforderten Bedingungen an das Dichtmaterial erfüllt.

Unterschätzt wurde allerdings die Aufsättigungsdauer, die mit 3.3 Jahren um einen Faktor 7 über der in Auslegungsrechnungen [6] bestimmten Dauer von 170 Tagen lag. Zur Verbesserung des offensichtlich noch nicht hinreichenden Prozessverständnisses und zur weiteren Absicherung der bisher in verschiedenen Rechencodes verwendeten Modelle sind daher entsprechende Weiterentwicklungen erforderlich.

2.1.3 In situ-Untersuchungen

Die Lage der SB-Nische im MTRL ist in der Abb. 2-7 dargestellt. Für die Untersuchungen wurden vier Bohrungen mit einem Durchmesser von 0.31 m und einer Tiefe von 3 m erstellt. Zwei Bohrlöcher wurden mit einer 35Ton/65Sand-Mischung, ein Bohrlöcher mit einer 50Ton/50Sand-Mischung und eine Bohrung mit gebrochenen Pellets der Nagra aus reinem Bentonit zum unmittelbaren Vergleich mit den Ton/Sand-Mischungen befüllt und bis zur erforderlichen Einbaudichte von rd. 1.9 bzw. 1.7 kg/m³ verdichtet.



Abb. 2-7 Lage der SB-Nische im Mont Terri Untertagelabor

Die Druckaufgabe mit synthetischem Formationswasser bzw. Gas erfolgt über eine Schrägbohrung, die wie im Mock Up-Test zu einer mit einem porösen Medium gefüllten Druckkammer, hier im untersten Teil des Bohrlochs, führt. Oberhalb des Dichtelements ist die Bohrung mit einem Packer abgedichtet und der verbleibende obere Teil der Bohrung mit Beton verfüllt. An der Packerunterseite, am oberen Ende der Dichtung, sind zwei Quelldruckaufnehmer installiert. Zwischen der Druckkammer und der Dichtung ist eine Filterfritte eingebaut, um eine homogene Verteilung des jeweiligen Fließmediums über den ganzen Querschnitt der Dichtung sicherzustellen. Eine weitere Filterfritte befindet sich zwischen der Dichtung und dem Packer, um das durch die Dichtung transportierte Fluid ebenfalls über den gesamten Querschnitt der Dichtung aufzufangen. Im Gegensatz hierzu sind im Dichtungsbereich entlang der Bohrlochwand keine weiteren Druckaufnehmer installiert, um das System nicht durch Fließwege entlang von Messkabeln zu beeinflussen. Es wird davon ausgegangen, dass der Druckverlauf im In-situ-Versuch grundsätzlich dem des Mockup-Tests entspricht.

Die Länge der Dichtungen mit 35Ton/65Sand beträgt 1 m. Da davon auszugehen ist, dass die Aufsättigungsdauer bei höheren Tonanteilen deutlich länger andauert, wurde die Länge der Dichtungen 50Ton/50Sand sowie die aus gebrochenen Bentonitpellets auf 0.5 m ausgelegt. Einen Einblick in die vollinstrumentierte Test-Nische mit Darstellung des prinzipiellen Aufbaus eines SB-Versuchsbohrlochs zeigt Abb. 2-8.

Entsprechend der nachzuweisenden Anforderungen sind die Versuche zur Ermittlung der folgenden Parameter ausgelegt:

- Anfangsgaspermeabilität nach der Installation durch Injektion von Stickstoff über die Fluidinjektionskammer,
- Menge des in den Dichtkörper und das umgebende Gebirge sowie der EDZ injizierten synthetischen Formationswassers,
- Quelldruck am oberen Ende der Dichtung unterhalb des Packers in der Aufsättigungsphase,
- Wasserpermeabilität der gesättigten Dichtung,
- Gaseintritts-/Gasdurchbruchdruck sowie Gaspermeabilität nach dem Gasdurchbruch in Wechselwirkung mit dem umgebenden Gebirge.

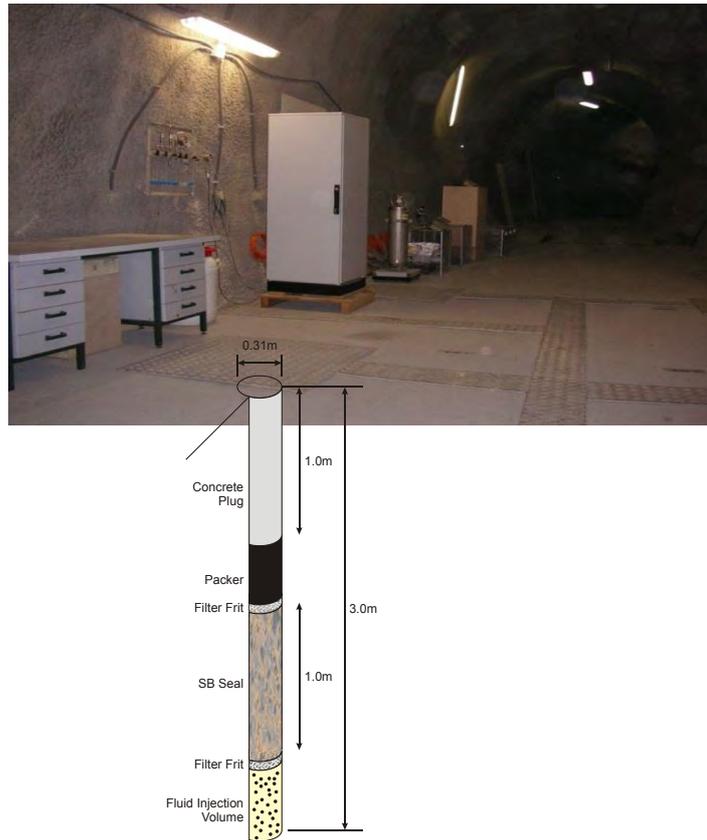


Abb. 2-8 Blick in die vollständig installierte Test-Nische mit prinzipiellem Aufbau eines SB-Versuchsbohrlochs

Nach Beendigung der In-situ-Tests ist vorgesehen, Proben aus den Dichtungskörpern und dem umgebenden Gebirge zu entnehmen, um sie im Labor auf Porosität, Sättigung und Homogenität hin zu überprüfen

Die anfänglich nach Einbau des Dichtmaterials ermittelten Gaspermeabilitäten betragen bei der Bohrung BSB2 (35Ton/65Sand) $3.29E-14 \text{ m}^2$ und bei der Bohrung BSB13 (Bentonitpellets der Nagra) $2.26E-13 \text{ m}^2$, was den in Tabelle 2.1 aufgeführten Anforderungen in guter Näherung entspricht.

Um künstlich erzeugte Randläufigkeiten entlang der Bohrlochwand zu vermeiden, wurden die Dichtelemente zunächst nur mit sehr geringen Drücken beaufschlagt. Damit sollte im Bereich der Eintrittsseite eine Quellung hervorgerufen werden, die zu einer Abdichtung zur Bohrlochwand führt. Anschließend wurden die Injektionsdrücke in der Bohrung BSB2 auf ca. 0.36 MPa und in der Bohrung BSB13 auf ca. 0.41 MPa eingestellt. Die Aufsättigung erfolgt mit synthetischem Formationswasser. Bisher

wurden in die Bohrung BSB2 117.55 l in 66 Monaten und in die Bohrung BSB13 24.16 l in 44 Monaten injiziert. Aufgrund der relativ großen injizierten Wassermengen in BSB2 musste von einem Abfließen des Wassers in den gestörten Bereich der Bohrlochwand ausgegangen werden. Im Laufe des Versuchs wurde bei der Bohrung BSB2 ein relativ geringer Druckabfall in der Druckkammer unterhalb des Dichtelements beobachtet, der auf eine Verstopfung der Injektionsleitung in der Strecke außerhalb des Bohrlochs zurückzuführen war. Nach der Beseitigung der Verstopfung konnte wieder ein ungestörter Versuchsablauf hergestellt werden. Der relativ geringe Druckabfall während der Verstopfung hat aber auch gezeigt, dass das umliegende Gebirge keine übermäßige Auflockerung im Randbereich aufweist. Im Gegensatz hierzu wurde bei den Bohrungen BSB1 und BSB15 im südlichen Teil der Nische relativ frühzeitig Wasser im oberen Bohrungsbereich festgestellt, so dass hier von Randläufigkeiten über den Bohrlochwandnahen Gebirgsbereich ausgegangen werden muss. Mit dem Ziel, möglicherweise eine durch Quellung hervorgerufene Abdichtung zwischen dem eingebauten Dichtmaterial und der Bohrlochwandung zu erreichen, wurden die Dichtintervalle dieser Bohrungen bei bleibendem Injektionsdruck durch Schließen der ausgangsseitigen Ventile eingeschlossen.

Die Gesamtdruckverläufe, gemessen unterhalb des Packers, belaufen sich bei BSB2 auf 0,14 und 0,19 MPa. Bei der mit reinem Ton gefüllten Bohrung BSB13 wurde der Messbereich der Druckaufnehmer von 3 MPa mittlerweile überschritten. Der Gesamtdruck liegt somit über 3 MPa. Die Druckverläufe der einzelnen Bohrungen sind in den Abb. 2-9 und Abb. 2-10 dargestellt. In den genannten Bohrlöchern wurde die angestrebte Aufsättigung bisher nicht erreicht und infolgedessen auch noch kein Wasseraustritt festgestellt, so dass die Versuche noch weitergeführt werden müssen.

Für die Bohrung BSB1 kann bzgl. der Druckverläufe innerhalb der Dichtung keine Aussage mehr getroffen werden, da die entsprechenden Drucksensoren inzwischen ausgefallen sind.

2.2 Zusammenfassung und Ausblick

Die bisher im SB-Experiment erzielten Ergebnisse sowohl im großmaßstäblichen Laborversuch (Mockup-Test) im GRS-Labor in Braunschweig als auch in den In situ-Versuchen im MTLR bestätigen die vorteilhaften Dichteigenschaften von gering kompaktierten Ton/Sand-Mischungen.

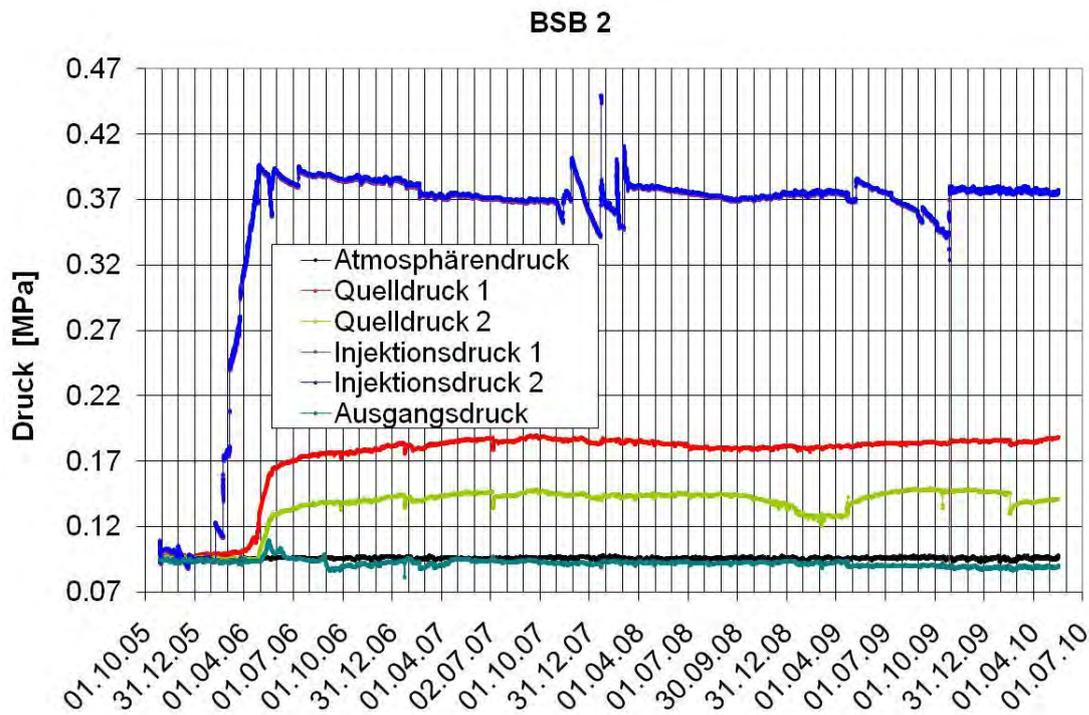


Abb. 2-9 Druckverlauf in der Bohrung BSB 2 (Ton/Sand-Mischung 35/65)

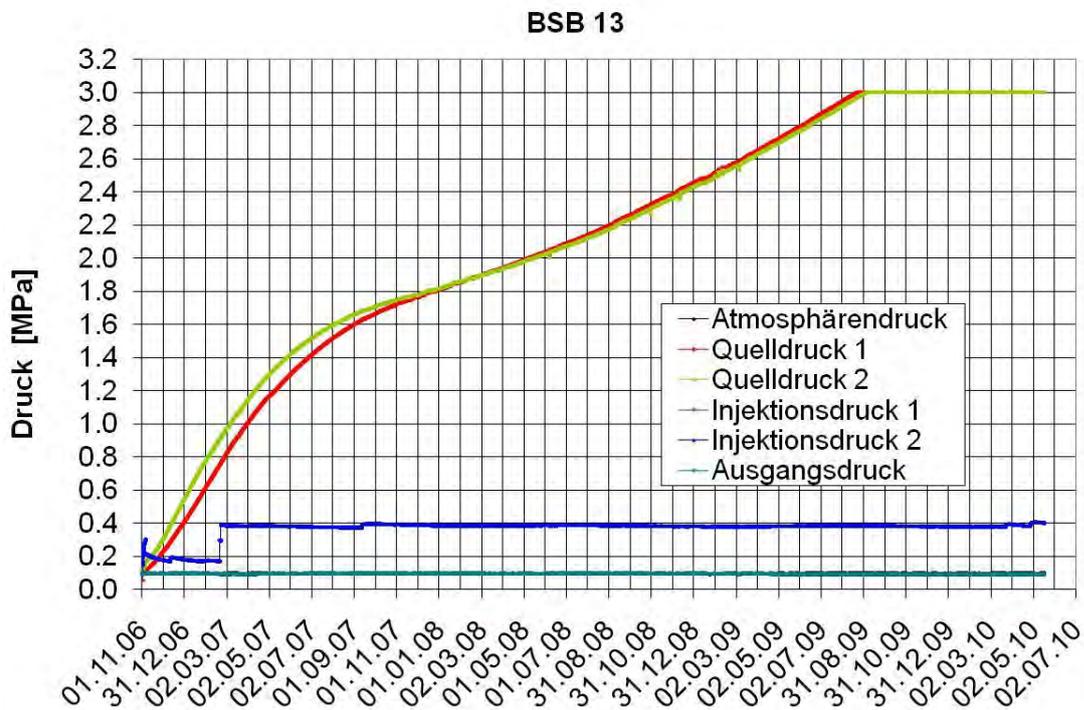


Abb. 2-10 Druckverlauf in der Bohrung BSB 13 (Bentonit-Pellets gem. Nagra-Spezifikation)

Eine zusammenfassende Zwischenbewertung stellt sich wie folgt dar:

- Die Dichteigenschaften einer optimierten 35%Tony/65%Sand-Mischung wurden im Mock Up-Versuch erfolgreich getestet/demonstriert. Charakteristische Materialdaten waren:
 - Trockeneinbaudichte von 1.9 g/cm^3 ,
 - hohe Gaspermeabilität von $7\text{E}-14 \text{ m}^2$ im ungesättigten Anfangszustand,
 - niedrige Wasserpermeabilität von $1.4\text{E}-18 \text{ m}^2$ bei Vollsättigung,
 - niedriger Gaseintrittsdruck von etwa 0.25 MPa im gesättigten Zustand.
- Bisher im In Situ-Experiment ermittelte Daten bestätigen die Ergebnisse des Mock Up-Versuchs und früherer Laboruntersuchungen an kleinen Proben.
- Der Mock Up-Versuch wird für die weitere Bestimmung des Gasmigrationsverhaltens, falls möglich, bis zur Bestimmung der 2-Phasenflussparameter fortgesetzt.
- Die beobachtete Aufsättigungsdauer ist deutlich länger als die aus den prediktiven Modellierungen resultierenden Zeiten; die entsprechenden Aufsättigungsmodelle müssen weiter entwickelt und auf Basis der Versuchsergebnisse kalibriert werden.

Sollte das SB-Material als Buffer- oder Bohrlochverschlussmaterial in HAW-Einlagerungsbohrlöchern in Tonsteinformationen verwendet werden, ist es zusätzlich zu den bisherigen Untersuchungen notwendig, das wärmetechnische Materialverhalten zu ermitteln. Dies wird in dem kürzlich gestarteten EU-Projekt PEBS der Fall sein. Die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten bzgl. der Eignung des SB-Materials als Alternative zu anderen tonigen Dichtungen werden somit auch in der Zukunft von der GRS fortgeführt werden.

3 Danksagung

Das SB-Projekt wird vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie unter dem Förderkennzeichen 02 E 9894 gefördert. Darüber hinaus wurde das Projekt zwischen 2004 und 2009 im Rahmen des EU-Projektes ESDRED auch von der Kommission der Europäischen Gemeinschaft unter der Vertragsnummer FI6W-CT-2003-508851 co-finanziert.

Die Autoren danken für die Unterstützung.

4 Referenzen

- [1] Miehe, R., Kröhn, K.-P., Moog, H. (2003): Hydraulische Kennwerte von tonhaltigen Mineralgemischen zum Verschluss von Untertagedeponien. Abschlussbericht (FKZ 02 C 0669 8), GRS-193, ISBN3-931995-61-5.
- [2] Bossart, P., Meier, P., Moeri, A., Trick, T., Mayor, J.-C., (2002): Geological and hydraulic characterization of the excavation disturbed zone in the Opalinus Clay of the Mont Terri Rock Laboratory. Engineering Geology 66, pp 19 – 38, Elsevier Science B.V.
- [2] NAGRA Technical Report 02-06, (2002): Project Opalinus Clay, Models, Codes and Data for safety Assessment – Demonstration of disposal feasibility for spent fuel, vitrified high-level waste and long-lived intermediate-level waste (Entsorgungsnachweis). NAGRA National Cooperative for the Disposal of Radioactive Waste.
- [3] Thury, M., Bossard, P. (1999): Mont Terri Rock Laboratory – Resultsof the Hydrogeological, Geochemical and geotechnical Experiments Performed in 1996 and 1997. Landeshydrogeologie und –geologie, Geologische berichte Nr. 23.
- [4] Rodwell, W.R.; Harris, A.W.; Horseman, S.T.; Lalieux, P.; Müller, W.; Ortiz amaya, L.; Pruess, K.: Gas Migration and Two-Phase Flow through Engineered and Geological Barriers for a Deep Repository for Radioactive Waste. A Joint EC/NEA Status Report, European Commission, 1999, EUR 19122 EN.
- [5] Jockwer, N., Miehe, R., Müller-Lyda, I. (2000): Untersuchungen zum diffusiven Transport in Tonbarrieren und Tongesteinen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, GRS-167.
- [6] Rothfuchs, T., Jockwer, N., Miehe, R., Zhang, C.-I. (2005): Self-sealing Barriers of Clay/Mineral Mixtures in a Clay Repository SB Experiment in the Mont Terri Rock Laboratory Final Report of the Pre-Project, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-212.

Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen:

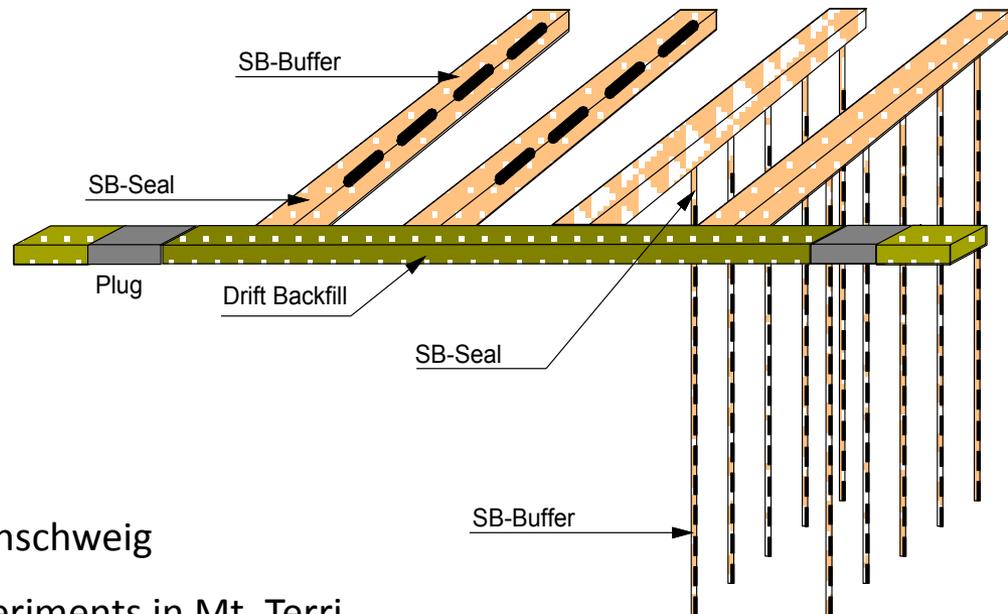
9. Projektstatusgespräch

Karlsruhe, 15. und 16. Juni 2010

Eignungsuntersuchung von Bentonit/Sand-Gemischen als Verschlussmaterial im Tonendlager

Tilman Rothfuchs, Rüdiger Miehe
GRS-Bereich Endlagersicherheitsforschung

SB-Experiment (Selbstdichtende Barrieren) im Mont Terri Untertagelabor



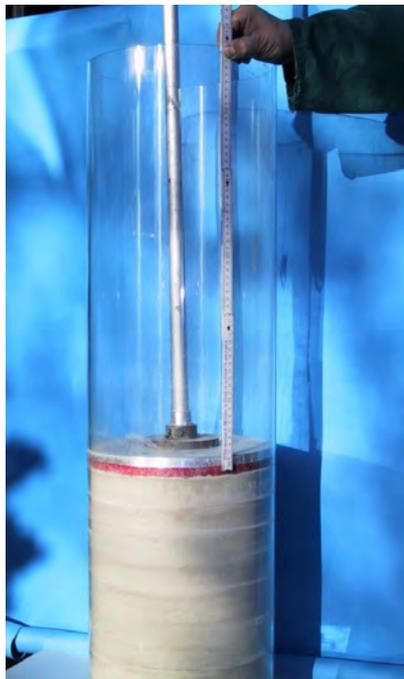
- ▶ Einführung
- ▶ Mock Up-Test im Labor in Braunschweig
- ▶ Aktuelle Daten des In situ- Experiments in Mt. Terri
- ▶ Zwischenbewertung

Vorteile optimierter Ton/Sand-Gemische als Verschlussmaterial in Endlagern

- Hohe Gaspermeabilität
im ungesättigten Zustand
- Niedriger Gaseintrittsdruck
im gesättigten Zustand
 - ➔ Vermeidung höherer Gasdrücke im Endlagernahfeld
- Hinreichend niedrige Wasserpermeabilität
im gesättigten Zustand
 - ➔ Diffusionskontrollierte Migration von Radionukliden im Buffer,
wie im Wirtsgestein

Ziel des SB Experiments

Demonstration der Funktion optimierter Ton/Sand-Mischungen als Buffer in Endlagern für radioaktive Abfälle



Im Labor untersuchte Gemische

35%Ton/65%Sand

50%Ton/50%Sand

70%Ton/30%Sand

Dichteigenschaften verschiedener Ton/Sand-Mischungen; gemessen an kleinskaligen Laborproben

Gemessene Parameter unter Einbaubedingungen					
	Gas- permeabilität (trocken)	Ausgangswasser- permeabilität bei Vollsättigung	Gaseintritts- /Gasdurch- bruchdruck	Gaspermeabilität nach Gasdurch- bruch	Quelldruck
Probe	m ²	m ²	MPa	m ²	MPa
35/65	1.2E-13	3.3E-17 - 9E-18 (5.2E-18)	0.4 - 1.1 (0.75)	1.1E-17 - 1.6E-17 (1.4E-17)	0.2 - 0.4 (0.28)
50/50	7.5E-14	1.1E-18 - 4.3E-18 (2.2E-18)	0.4 - 2.8 (1.83)	5.5E-18 - 6.2E-18 (5.9E-18)	0.3 - 0.5 (0.35)
70/30	1.2E-15	5.5E-19	1	n.d.	0.4-?
Anforderungen					
	Gaspermea- bilität (trocken)	Ausgangswasser- permeabilität bei Vollsättigung	Gaseintritts- /Gasdurch- bruchdruck	Gaspermeabilität nach Gasdurch- bruch	Quelldruck
	hoch	1E-17 - 1E-18	< 2	hoch	< 2

Fünf Stufen des Mont Terri SB Experiments

1

Tests an kleinen
Laborproben



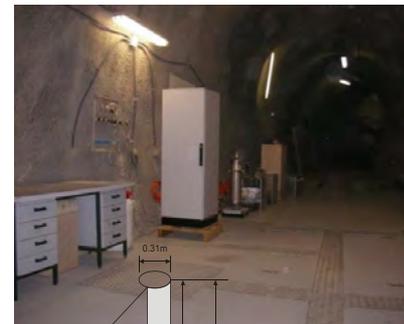
3

Mock Up-Tests
im Maßstab 1:1



4

In Situ-Experiment im
Mont Terri Untertagelabor

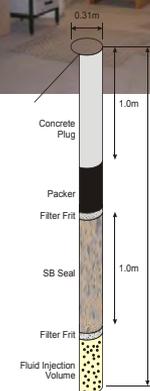
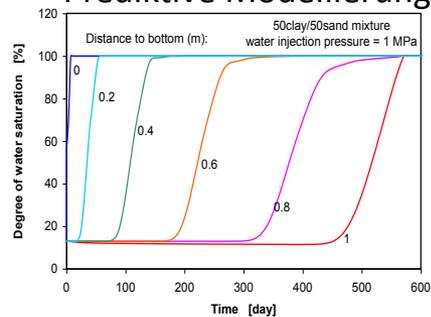


5

Modell-
entwicklung

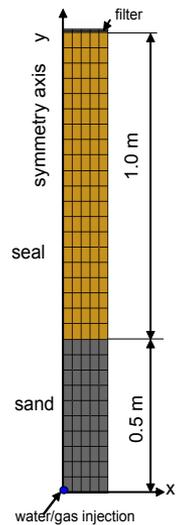
2

Experimentauslegung
Prediktive Modellierung

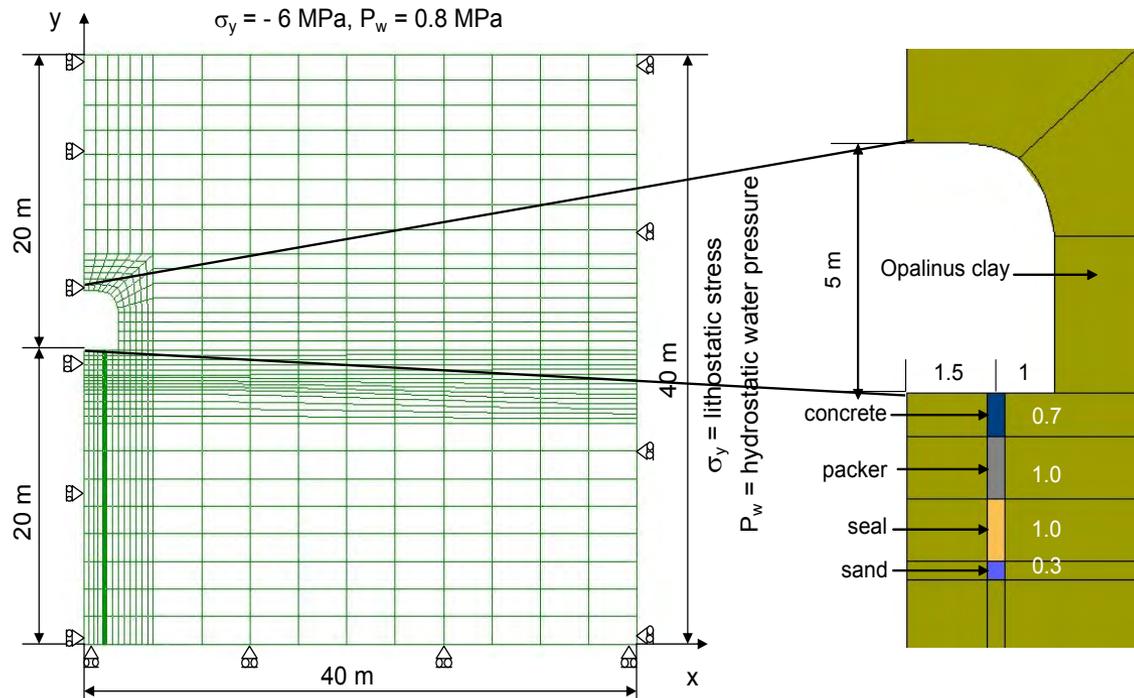


Prediktive Modellierung der Bufferaufsättigung

Mock Up-Test



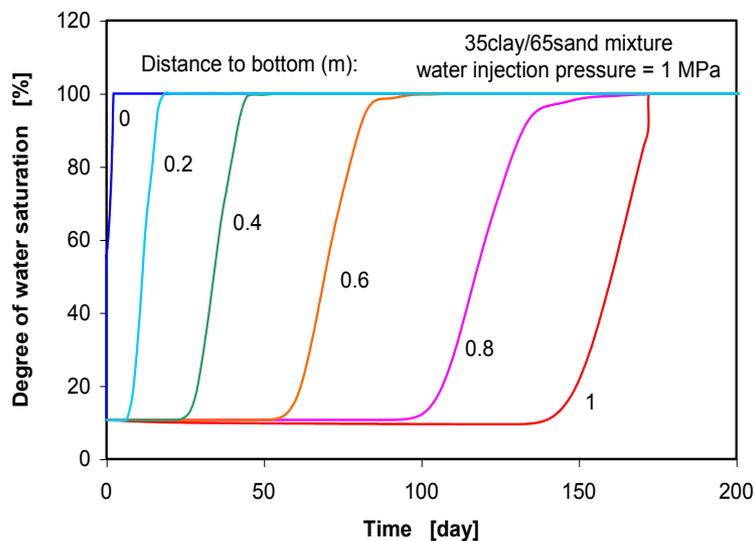
In Situ-Test



7

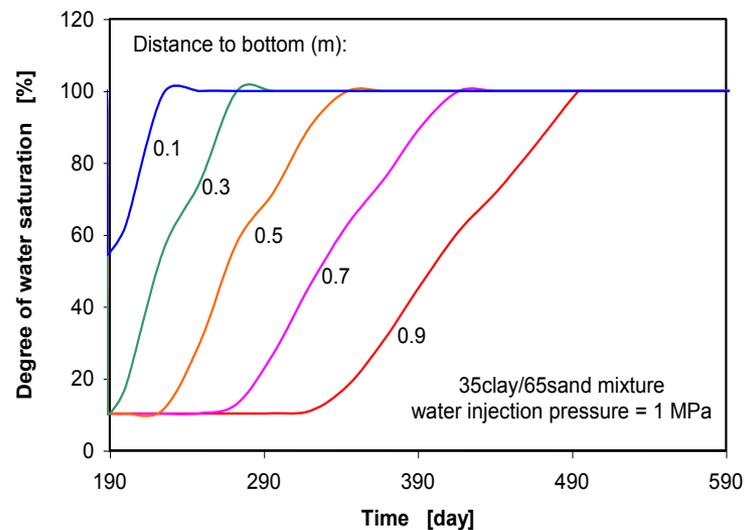
Aufsättigungsdauer

Mock Up-Test



**Vorhergesagte
Aufsättigungsdauer:
170 Tage**

In Situ-Test



**Vorhergesagte
Aufsättigungsdauer:
300 Tage**

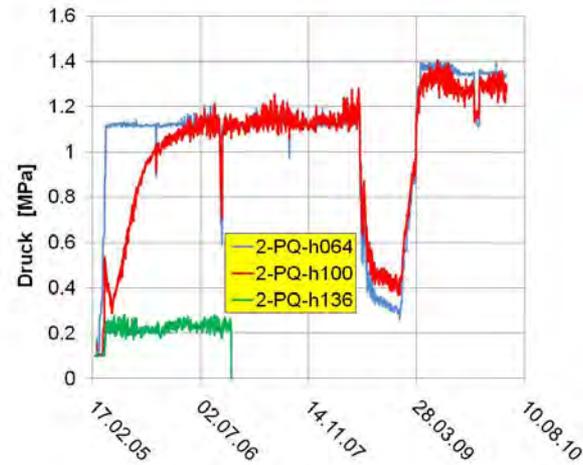
Ziele des Mock Up-Tests

- Entwicklung und Erprobung von Verfahren zur Herstellung von Ton-Sand-Gemischen mit hinreichender Homogenität
- Entwicklung und Erprobung von Methoden zur Installation von Ton-Sand-Gemischen mit der erforderlichen Trockendichte ohne Entmischung
- Erprobung von Messaufnehmern und Datenerfassungsanlagen
- Ermittlung der Aufsättigungsdauer
- Bestimmung von
 - Gaspermeabilität im ungesättigten Zustand
 - Wasserpermeabilität im gesättigten Zustand
 - Quelldruck
 - Gaseintrittsdruck/-durchbruch im gesättigten Zustand

Ergebnisse des Mock Up-Tests



Gesamtdruckentwicklung
Während der Aufsättigung

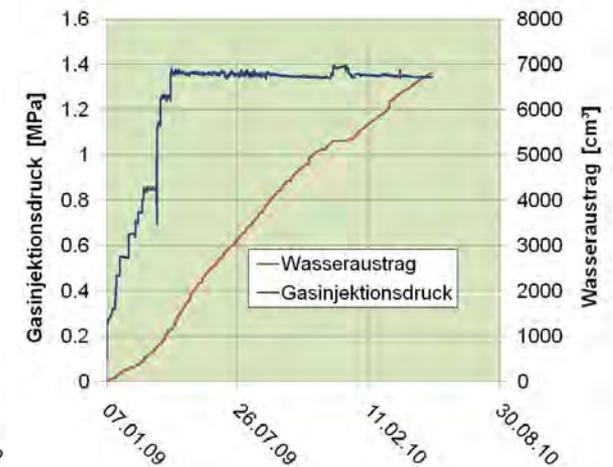


- Wasserpermeabilität $3E-18 \text{ m}^2$
- Quelldruck 0.35 MPa

**Gute Vergleichbarkeit mit
Laborergebnissen**

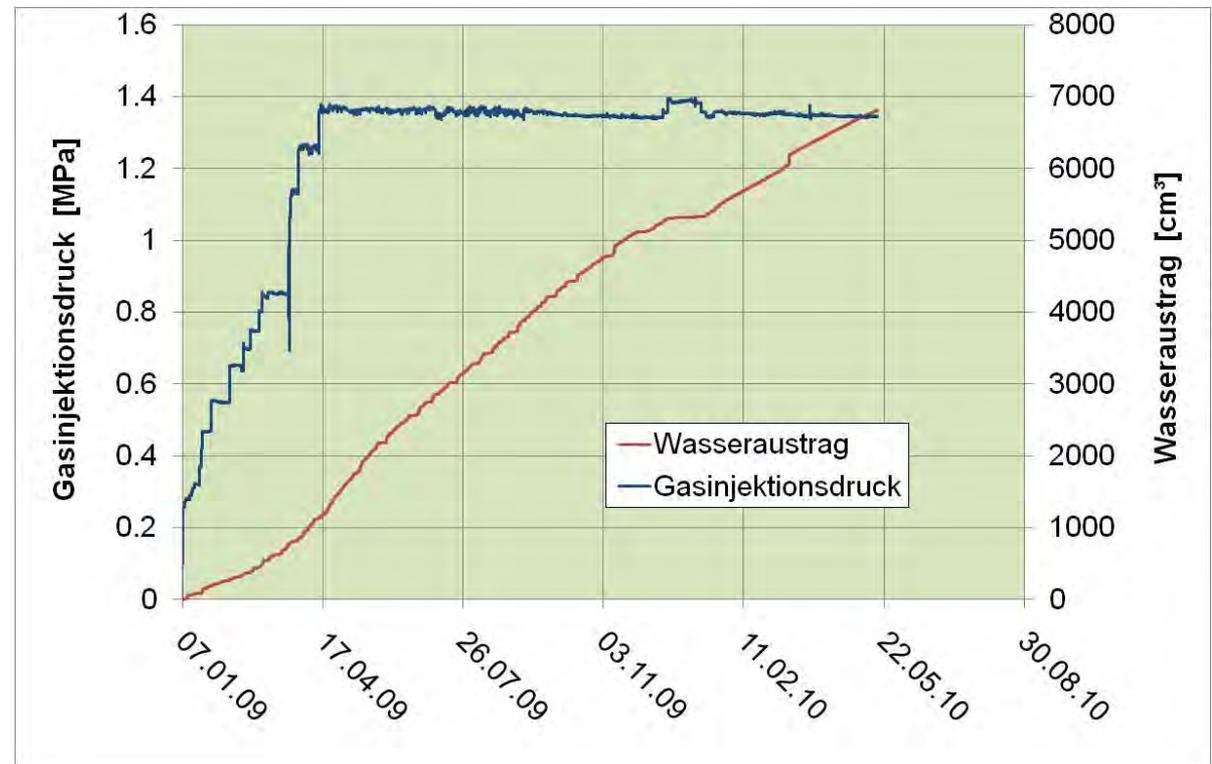
- Aufsättigungsdauer: 3.3 Jahre,
7-fache Dauer gegenüber Vorhersage

Gasdruckaufgabe und
Wasseraustrag



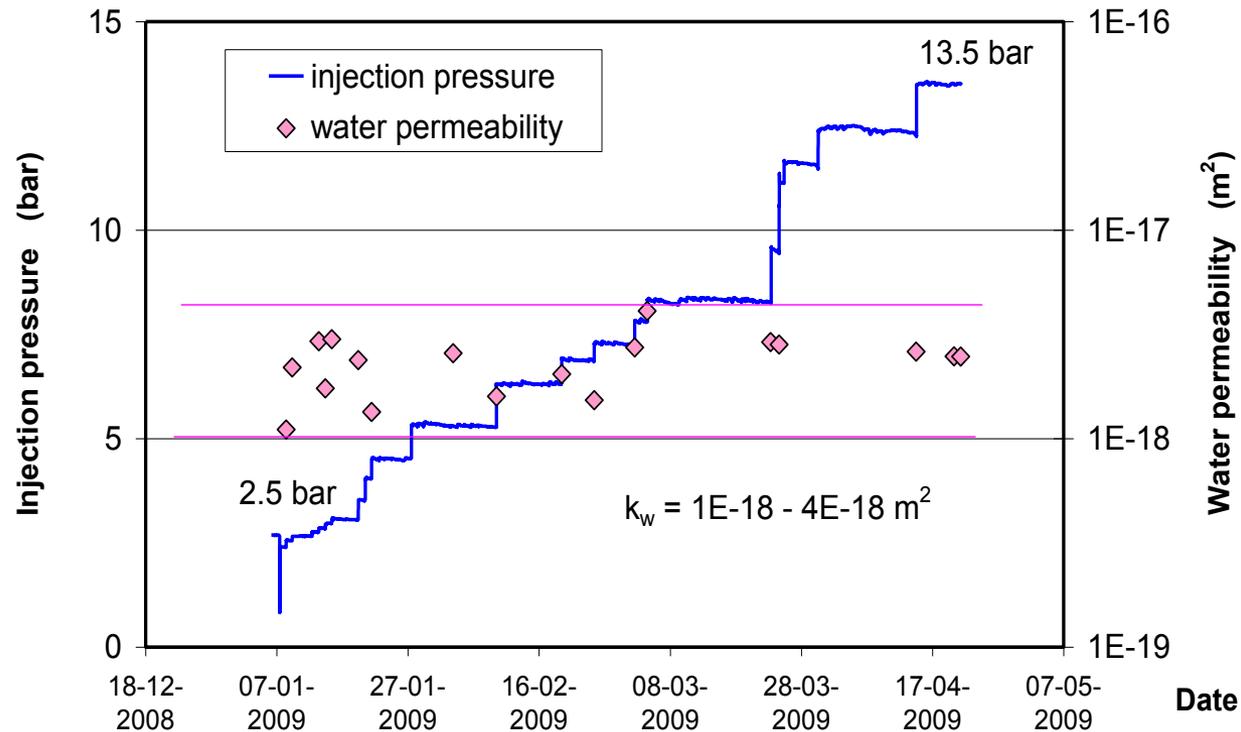
Niedriger Gaseintrittsdruck 0.25 Mpa

Bestimmung des Gaseintritts- bzw. -durchbruchdrucks



- Gaseintrittsdruck von 0.25 MPa stimmt mit den an kleinen Proben gemessenen Quelldrücken überein
- Gaseintrittsdruck und Gasdurchbruchdruck sind identisch; Verdrängung des Porenwassers innerhalb der Dichtung ist mit lokalem Gasdurchbruch gleich zu setzen
- Gasdurchbruch in der Großprobe braucht im Vergleich zu kleinen Laborproben sehr viel Zeit
- Aus diesem Grund wurde der Gasfluss durch stufenweises Anheben des Gasinjektionsdruck gesteigert, was allerdings weder für die Bestimmung des Durchbruchdrucks noch für die Nahfeldsituation im Endlager repräsentativ ist

Bestimmung der Wasserpermeabilität während des Gasinjektionstests



- Wasserpermeabilität beträgt rd. $\sim 2 \times 10^{-18} \text{ m}^2$, gute Übereinstimmung mit Laborwerten
- Wasserpermeabilität ist unabhängig vom Injektionsdruck: Bestätigung des Darcy-Gesetzes

Prediction of time needed for gas breakthrough

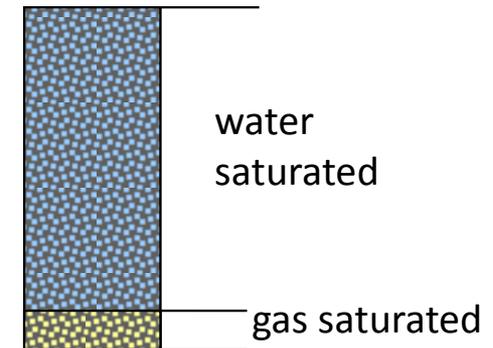
Seal: $L = 1 \text{ m}$, $D = 30 \text{ cm}$, $\phi = 30\%$
 Pore volume occupied by gas
 = displaced water volume
 = 1265 cm^3 during 3 months gas injection

- Model 1:

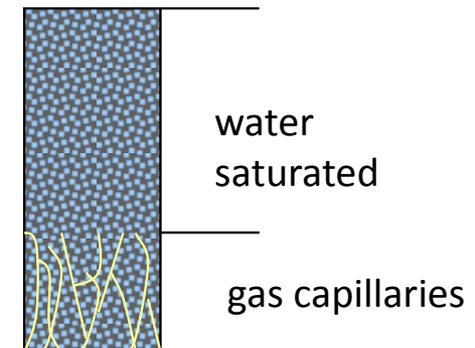
- the pore water was homogeneously displaced by gas from the bottom upwards, porosity $\phi_g = 30\%$
- the displaced length during 3 months $\approx 6 \text{ cm}$
- further duration for breaking \approx **2 years**

- Model 2:

- gas flows along the generated capillaries with little displacement of the pore water, capillary $\phi_g = 5\%$
- the displaced length during 3 months $\approx 30 \text{ cm}$
- further duration for breaking \approx **3 months**

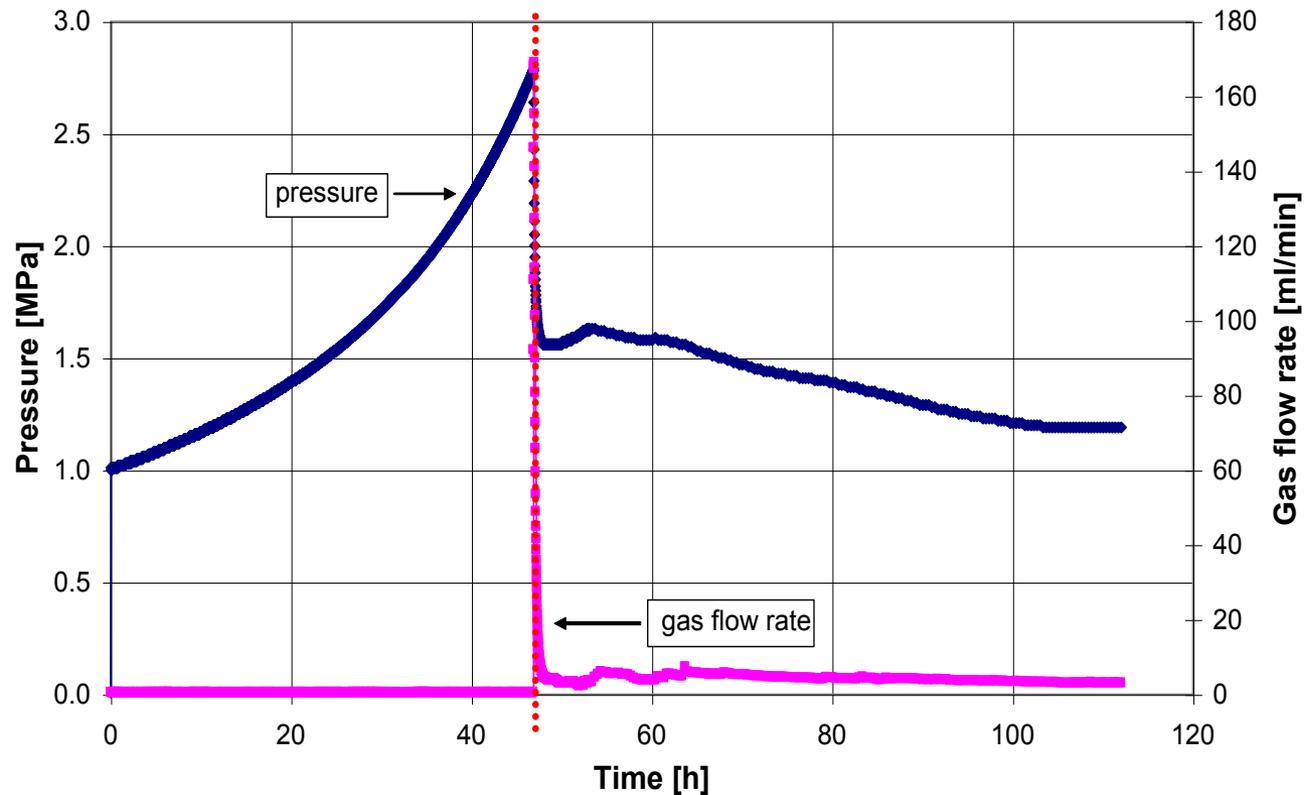


Model 1



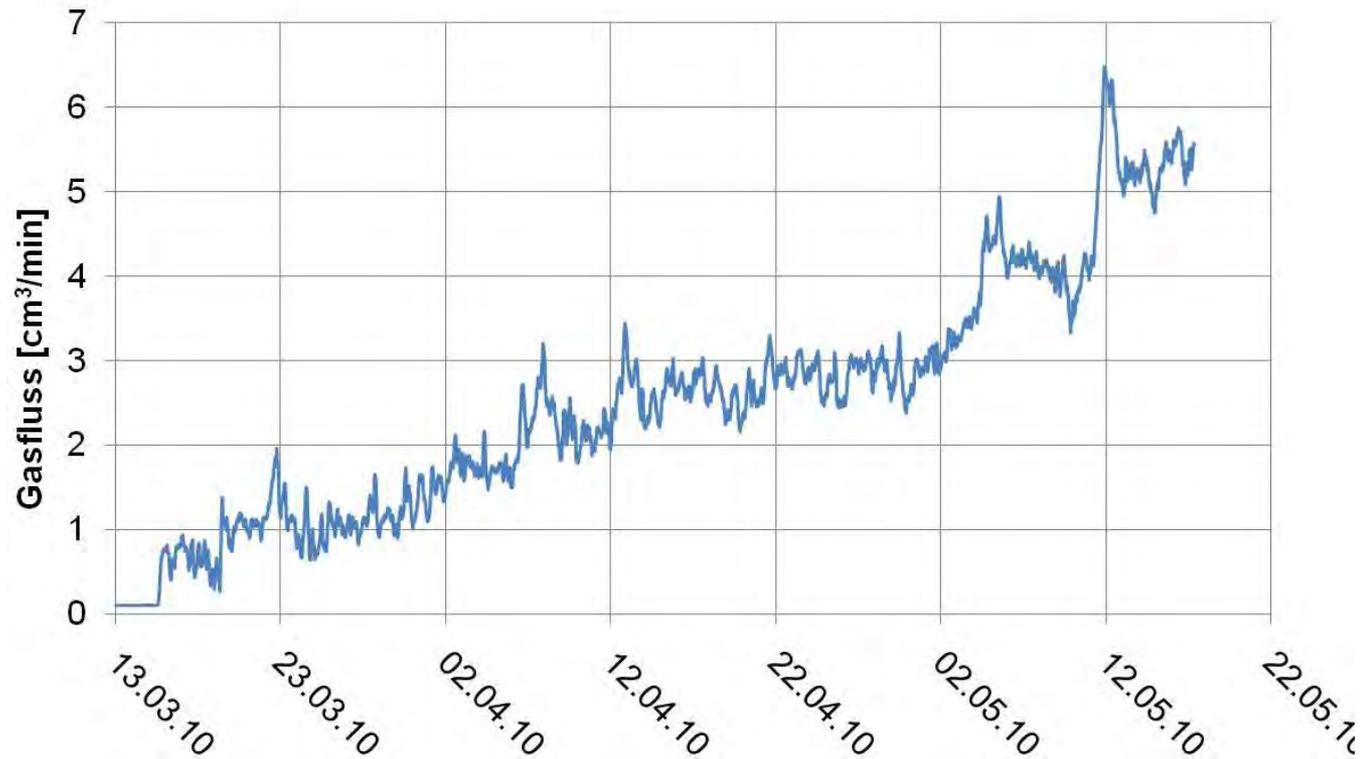
Model 2

Which model is realistic ?



Druck- und Fließratenentwicklung am Probenausgang einer 50/50 Ton/Sand-Probe ;
gestr. Linie: Gasdurchbruch (HPLC-Pumprate: 0.2 ml/min)

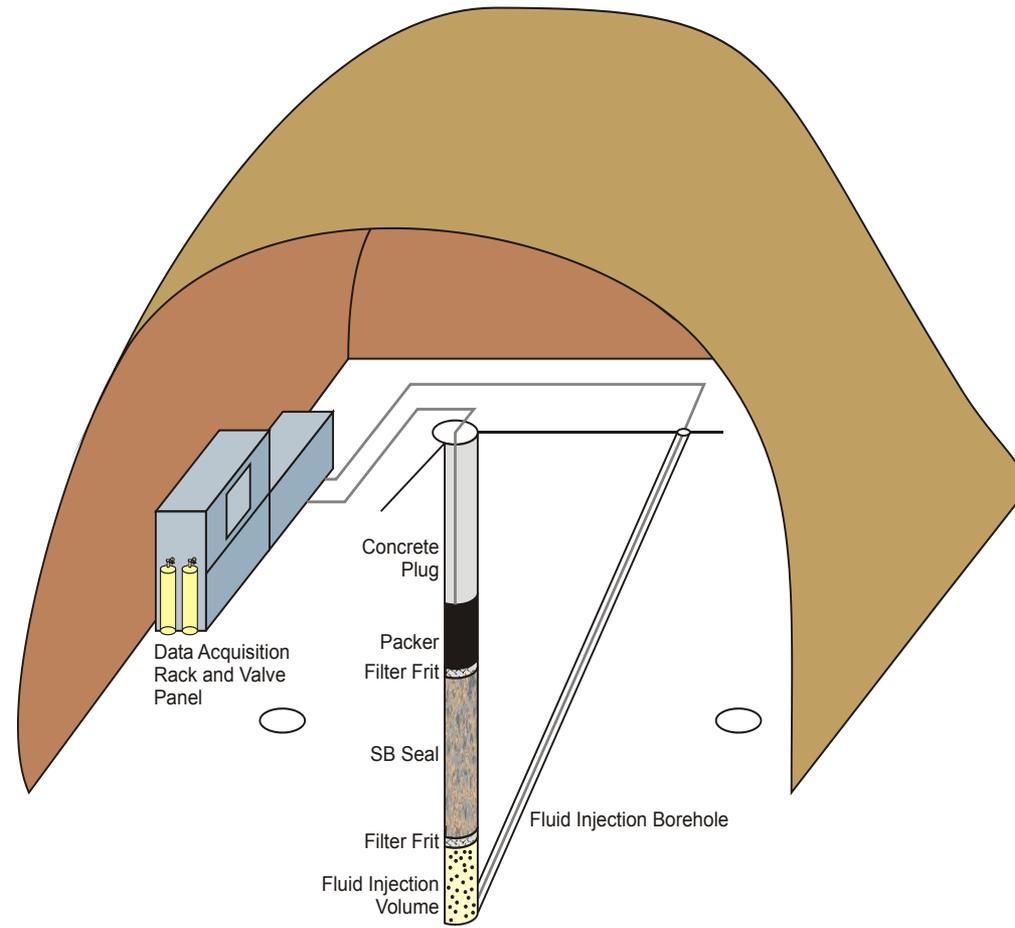
Mock Up-Test: Abschließender Gasinjektionstest Gasfließraten nach Gasdurchbruch



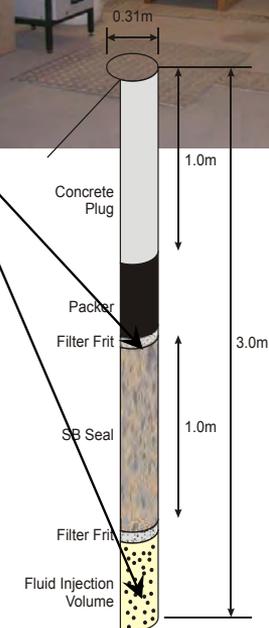
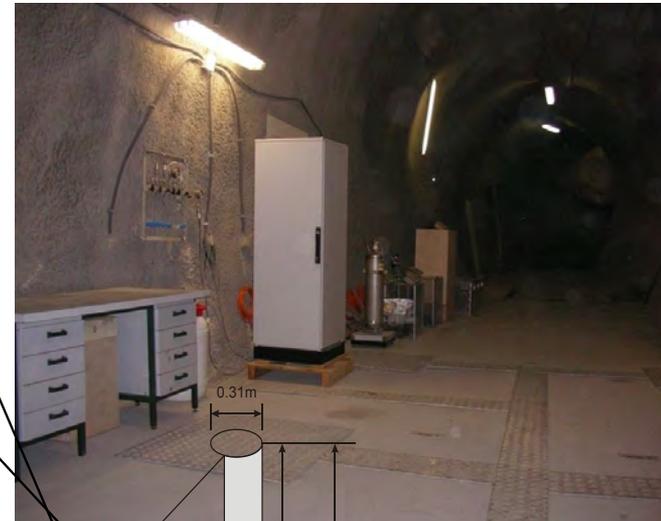
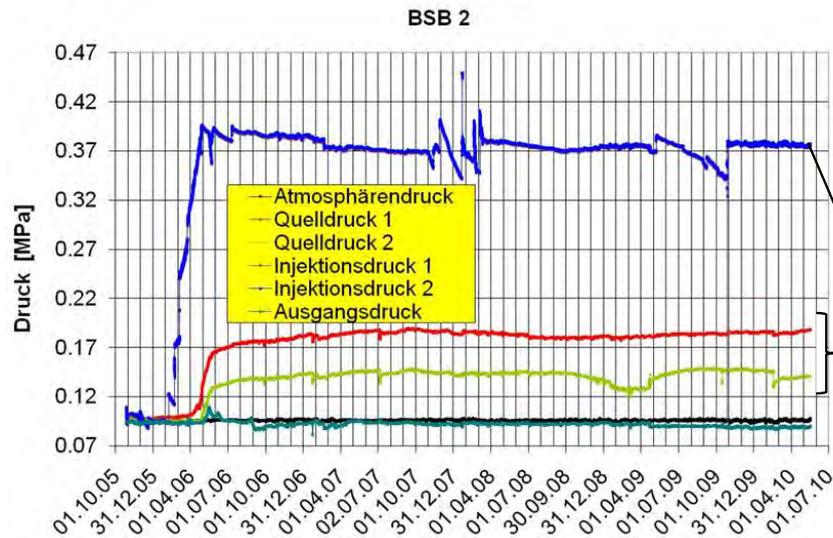
Status Mock Up-Tests

- Gaspermeabilität der trockenen Mischung 
- Aufsättigung mit Wasser (Rate und Menge) 
- Wasserpermeabilität bei Vollsättigung 
- Gaseintrittsdruck 
- Gasdurchbruchdruck  Gaspermeabilität rd. 10^{-18} m^2
- Entsättigung des Gemisches bei verschiedenen Druckniveaus mit Bestimmung der Zweiphasenflussparameter **steht aus**

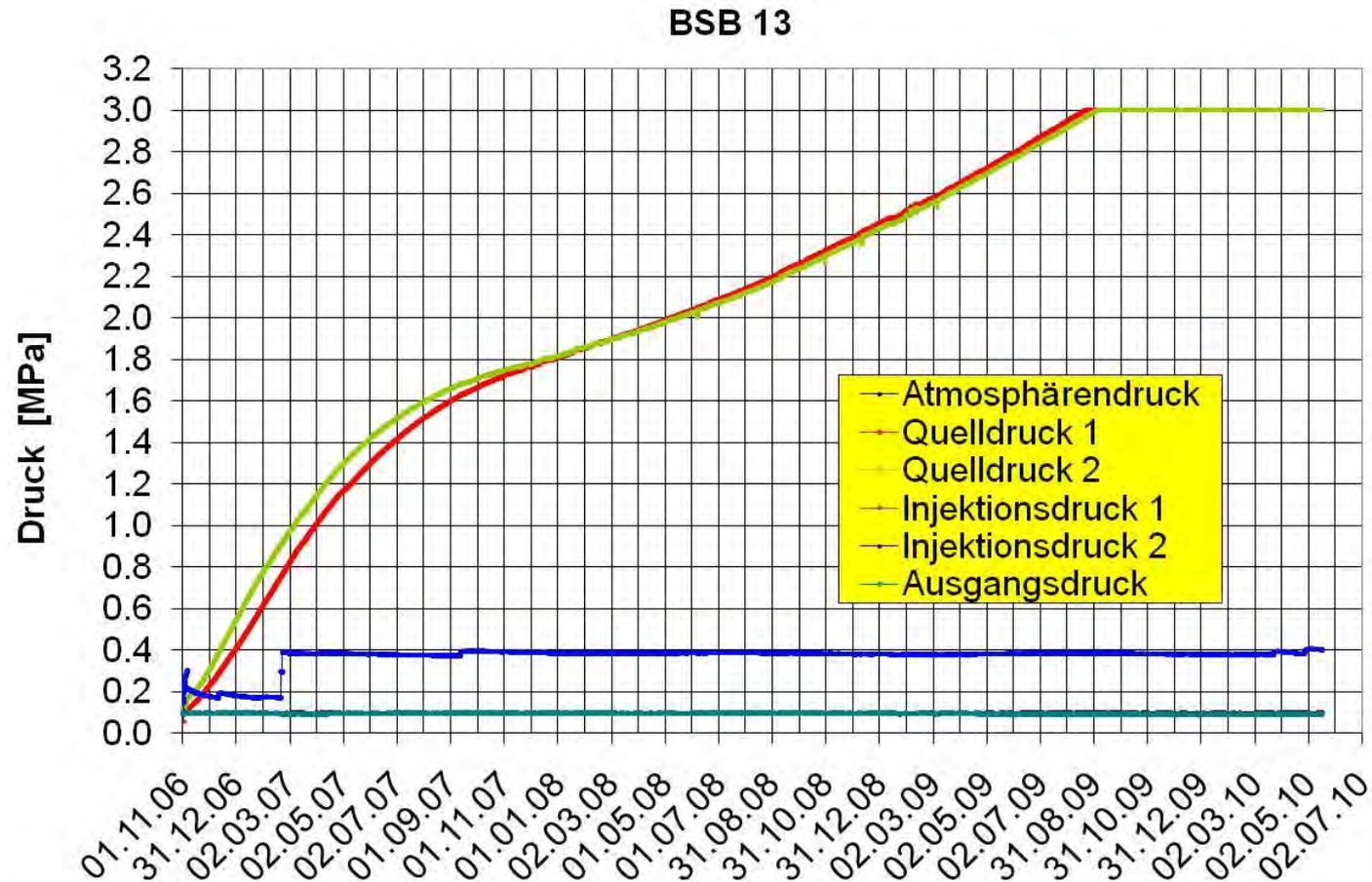
Test Nische im Mont Terri Untertagelabor



In Situ-Messergebnisse



- Bestimmung der Wasserpermeabilität steht aus
- Quelldruck beträgt aktuell rd. 0,18 MPa
- Aufsättigung dauert an: gegenwärtig etwas mehr als 4 Jahre, rd. 5-fach gegenüber Vorhersage
- Aufsättigung wird bis zur Vollsättigung fortgesetzt



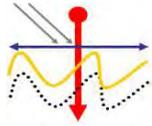
aktuell rund 24 Liter Wasser injiziert

Status In-Situ-Experiment

- Gaspermeabilität der trockenen Mischung 
- Aufsättigung mit Wasser (Rate und Menge) **dauert an**
- Wasserpermeabilität bei Vollsättigung **steht aus**
(mit Abschätzung des Wasserverlustes in das umliegende Gebirge)
- Gaseintrittsdruck **steht aus** / Gasdurchbruchdruck **fraglich**
- Entsättigung des Gemisches bei verschiedenen Druckniveaus mit Bestimmung der Zweiphasenflussparameter **fraglich**

Zwischenbewertung

- Die Dichteigenschaften einer optimierten 35%Ton/65%Sand-Mischung wurden im Mock Up-Versuch erfolgreich getestet/demonstriert.
Charakteristische Materialdaten waren:
 - Trockeneinbaudicht 1.9 g/cm^3
 - hohe Gaspermeabilität von $7\text{E}-14 \text{ m}^2$ im ungesättigten Anfangszustand,
 - niedrige Wasserpermeabilität von $2\text{E}-18 \text{ m}^2$ bei Vollsättigung
 - niedriger Gaseintrittsdruck von etwa 0.25 MPa im gesättigten Zustand
- Bisher im In Situ-Experiment ermittelte Daten bestätigen die Ergebnisse des Mock Up-Versuchs und früherer Laboruntersuchungen an kleinen Proben
- Der Mock Up-Versuch wird für die weitere Bestimmung des Gasmigrationsverhaltens (falls möglich) bis zur Bestimmung der 2-Phasenflussparameter fortgesetzt
- Die beobachtete Aufsättigungsdauer ist deutlich länger als die aus den prediktiven Modellierungen resultierenden Zeiten; die entsprechenden Aufsättigungsmodelle müssen weiter entwickelt und auf Basis der Versuchsergebnisse kalibriert werden



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Karlsruher Institut für Technologie

Forschungsverbundvorhaben

„Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“

– Statusbericht –

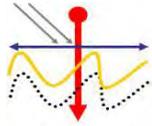
Johannes Gerardi, BGR

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Karlsruher Institut für Technologie

Forschungsvorhaben

„Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“

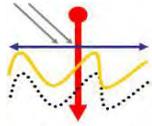
- Laufzeit vom 1. September 2006 bis zum 31. Dezember 2010, wird beispielhaft am Bergschadengebiet der Stadt Staßfurt durchgeführt.
- Knüpft an das Vorgängerprojekt *„Maßnahmen der nachhaltigen Gefahrenabwehr für Altlasten in Gebieten mit bergbaubedingten Destabilisierungsvorgängen am Beispiel der Stadt Staßfurt“* der Jahre 2000 bis 2002 an.

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Karlsruher Institut für Technologie

Ziele des Forschungsvorhabens

Entwicklung und Erprobung eines Instrumentariums zur Beschreibung und Bewertung des Ist-Zustandes und Prognose der zukünftigen Schadenentwicklung

Übertragbarkeit der Methoden auf vergleichbare Bergschadengebiete

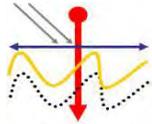
Beitrag zur nachhaltigen Wiedernutzung geschädigter Bergbau-Flächen in urbanen Räumen im Sinne des BMBF-Förderprogramms „Forschung für die Nachhaltigkeit“ (FONA)

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Partner im Forschungsverbund

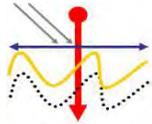


Koordination:
Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe



9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe

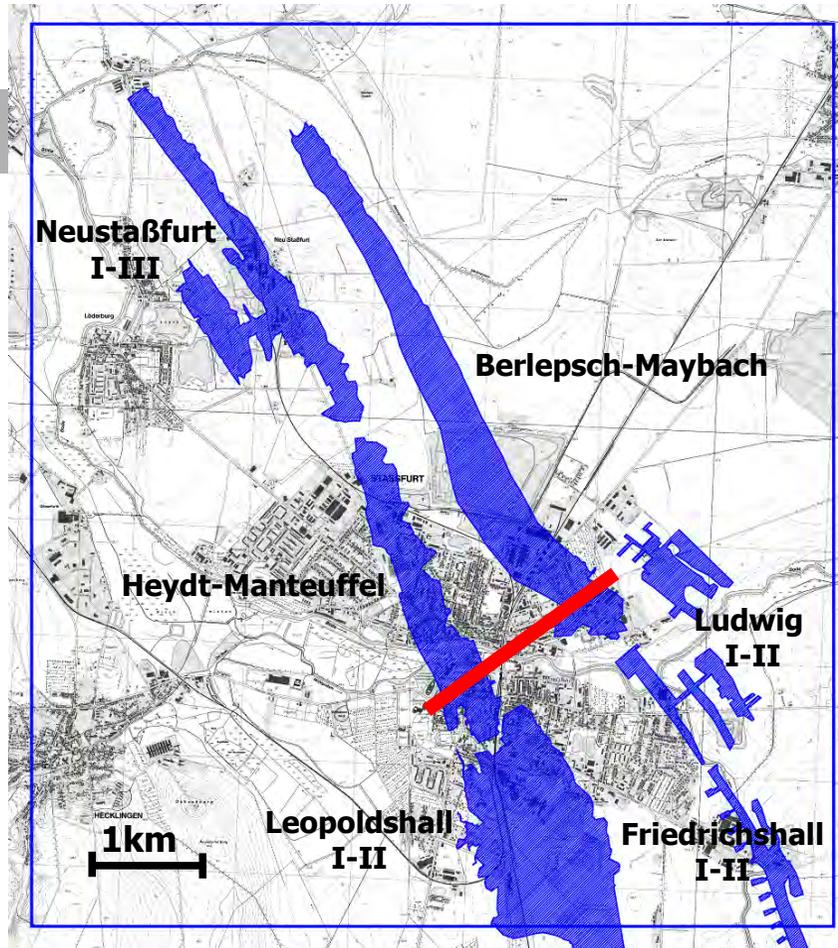




Forschungsverbund
Dynamik abgeöffneter oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Arbeitsgebiet

Topographische Karte von
Staßfurt 1:25 000

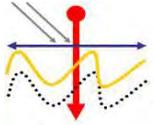
- Arbeitsgebiet
- Umriss der bearbeiteten
Kalibergwerke
- Geologischer
Schnitt

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



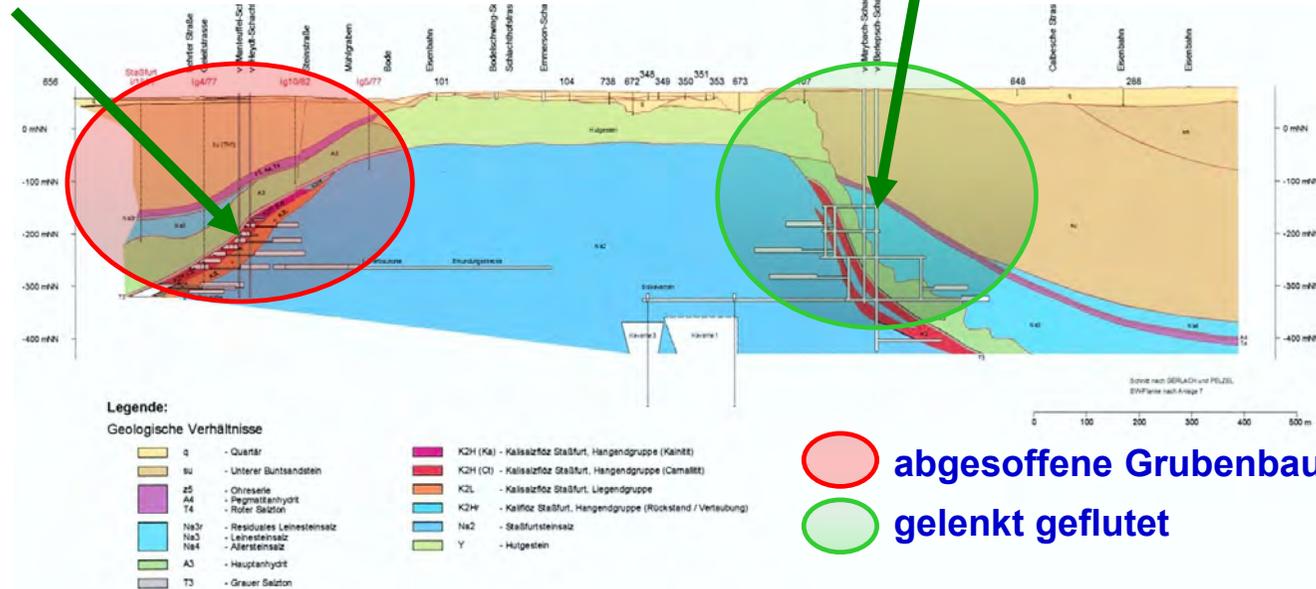
Salzgruben am Staßfurter Sattel

SW - Flanke

NE - Flanke

v. d. Heydt- v. Manteuffel / Leopoldshall I, II

v. Berlepsch- v. Maybach

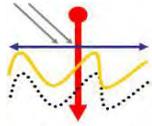


9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Vom Schadenbild zum Forschungsprogramm



**Senkungen
im
Stadtgebiet**

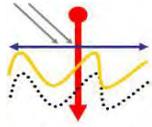
Bereich der
latenten
Bruchgefähr-
dung

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Vom Schadenbild zum Forschungsprogramm

Die treibenden Kräfte des Senkungsgeschehens (Prozesse)

Prozess

- **Bruchvorgänge in Gruben oder Karst**
- **Lösung im Salinar**
 - **Anhydritvergipsung/Gipslösung**
 - **Subrosion**
 - **Salzauflösung**

Folge

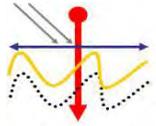
- **Senkung bis Tagesbruch**
- **Gipskarstbildung, Erdfälle**
- **meist flächenhafte Absenkung**
- **Senkung, Erdfälle**

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Karlsruher Institut für Technologie

Vom Schadenbild zum Forschungsprogramm

Tagesbrüche und Erdfälle



Tagesbruch Leopoldshall I/II, (1899); heute
Strandbad



Erdfall (Gipskarst) in Staßfurt-Rathmannsdorf

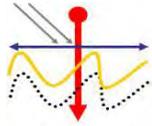
C2007 LAGB

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Forschungsprogramm

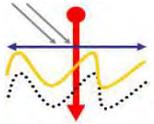
- **Aero- und, bodengeophysikalische Erkundung: HEM, PSInSAR, Geoelektrik, HEM, Seismik**
- **gravimetrische Messungen unter Einbeziehung der Altdaten**
- **hydrogeologische/hydraulische und hydrodynamische Untersuchungen und Monitoring**
- **hydrochemische und isotopengeochemische Untersuchungen, Lösungskinetik**
- **Flach- und Tiefbohrungen zur Gewinnung von Kennwerten und zur Erkundung: Geologie, Gruben, Grundwasserverhältnisse und Hydrodynamik (Druck, Fließrichtung/Geschwindigkeit)**
- **Erstellung eines geologischen 3D- und Grubenhohlraummodells**
- **Revision der Altbohrungen im Arbeitsgebiet**
- **Erstellung eines 3D-Strömungs- und Transportmodells**
- **geomechanische Modellrechnungen für das Bergschadengebiet**
- **seismologisches Monitoring der Bereiche latenter Bruchgefährdung**
- **Bohrkerntomografie und Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität**
- **Bohrkerndokumentation, Kernscannen, Projektdatenbank**

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgeöffneter oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks

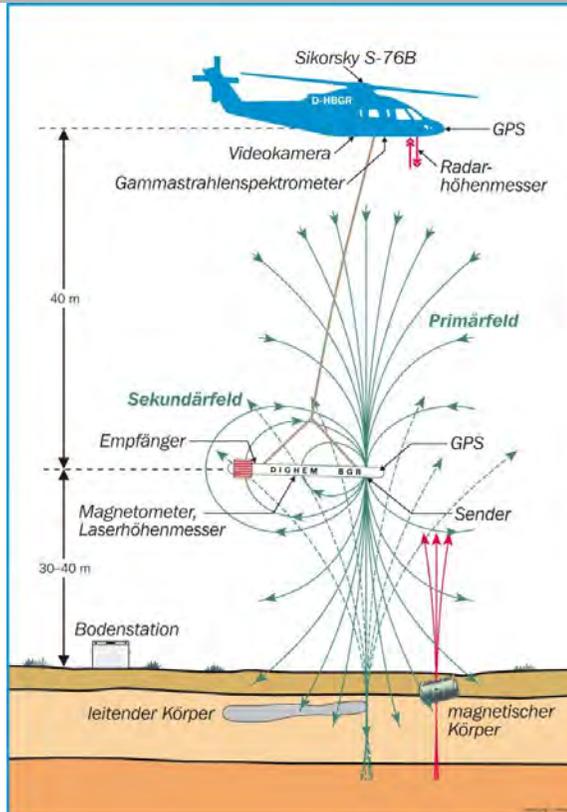


Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



KIT
Karlsruher Institut für Technologie

Forschungsprogramm Aerogeophysik (BGR)



➤ 460 km²

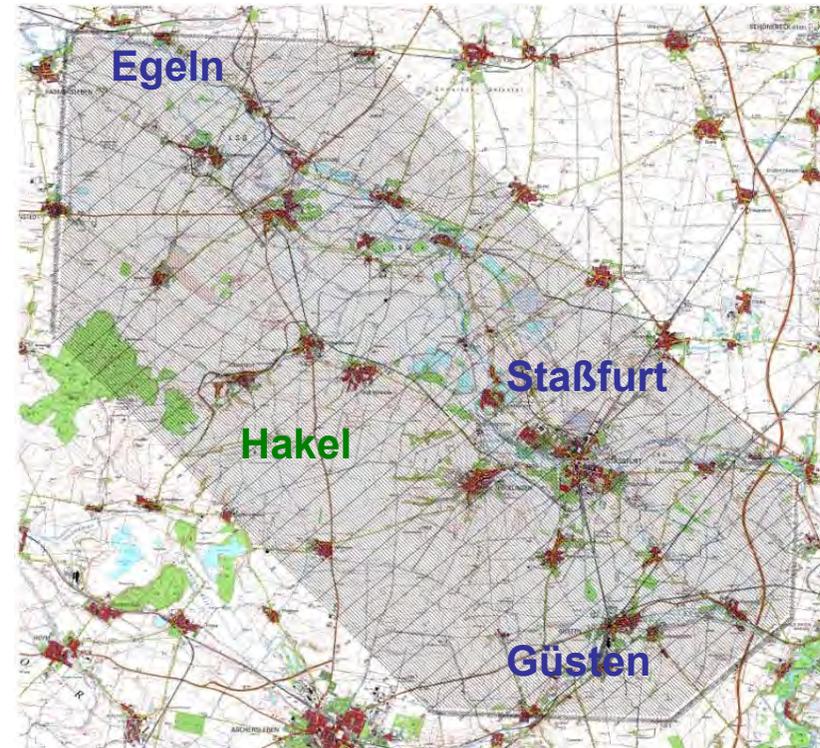
Messergebnis

Leitfähigkeits-
verteilung im
Gelände

Messanordnung

Hubschrauber-
messsonde

Elektromagnetische Kartierung

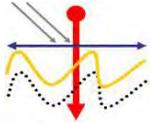


9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



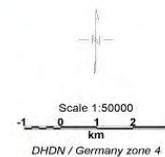
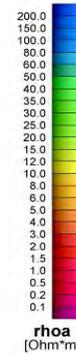
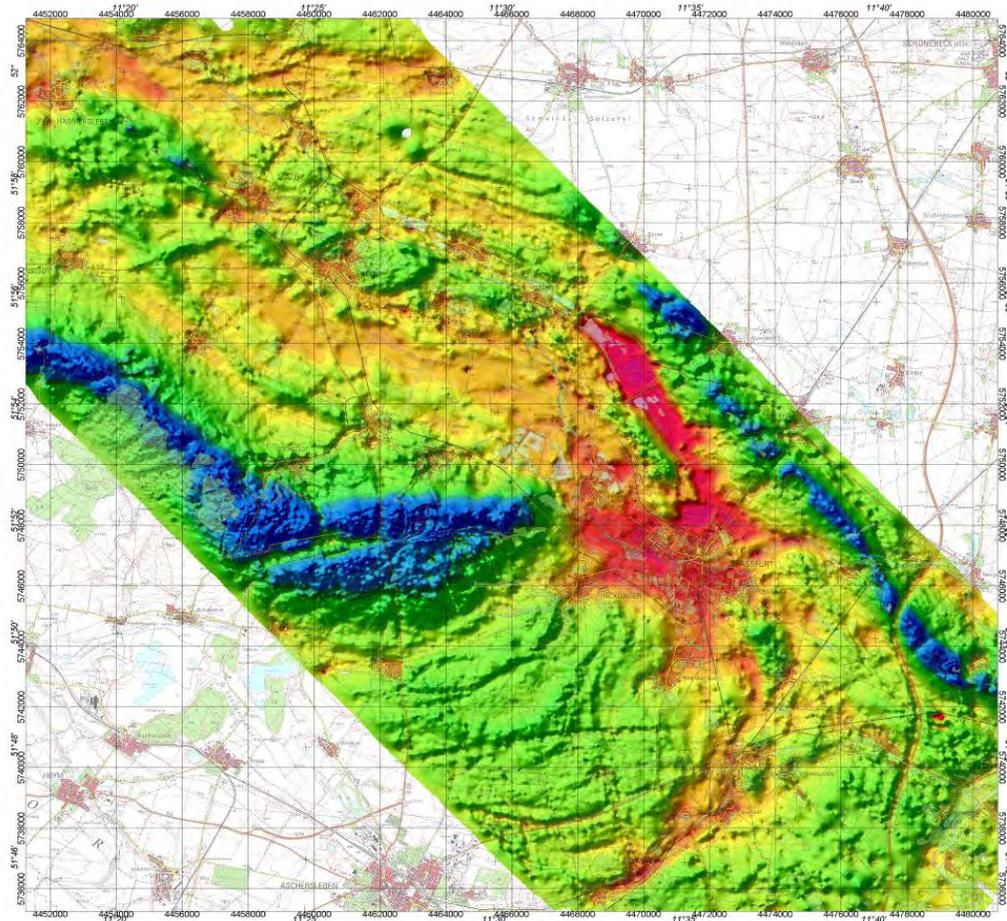
Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefuteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Karlsruher Institut für Technologie



HEM-Rohdaten
Abbildung mit
hoher Auflösung
20 m – 150 m
Eindringtiefe

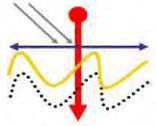
100 m Fluglinien-
abstand
Freq. 1,8 kHz

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

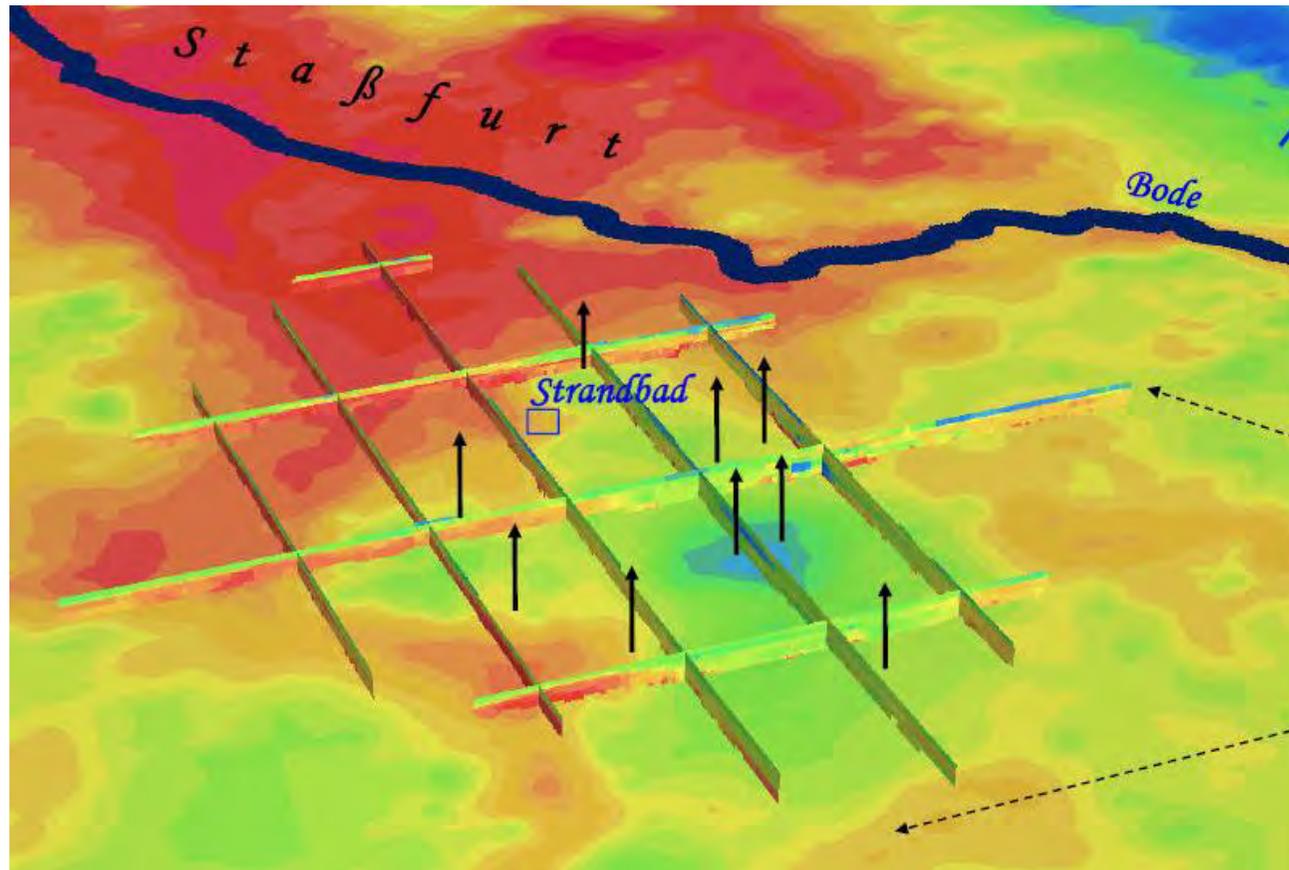
GEOZENTRUM HANNOVER



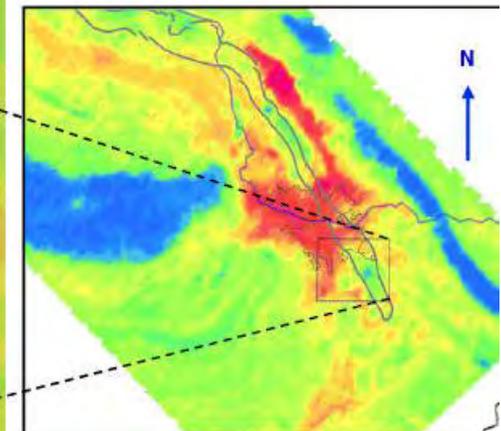
Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



HEM-Profile
zur
Interpretation
der
Hydro-/Geologie

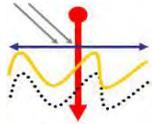


9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Forschungsprogramm Grundwasser (BTU, BGR, IHU, LAGB)

Hydro- und Geologisches Flach- und Tiefbohrprogramm



Hohlschneckenbohrung, Messstellenausbau
ca. 60 Bohrungen



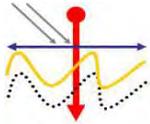
7 Tiefbohrungen zur Erkundung der Geologie,
Hydrodynamik und Gebirgsmechanik

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



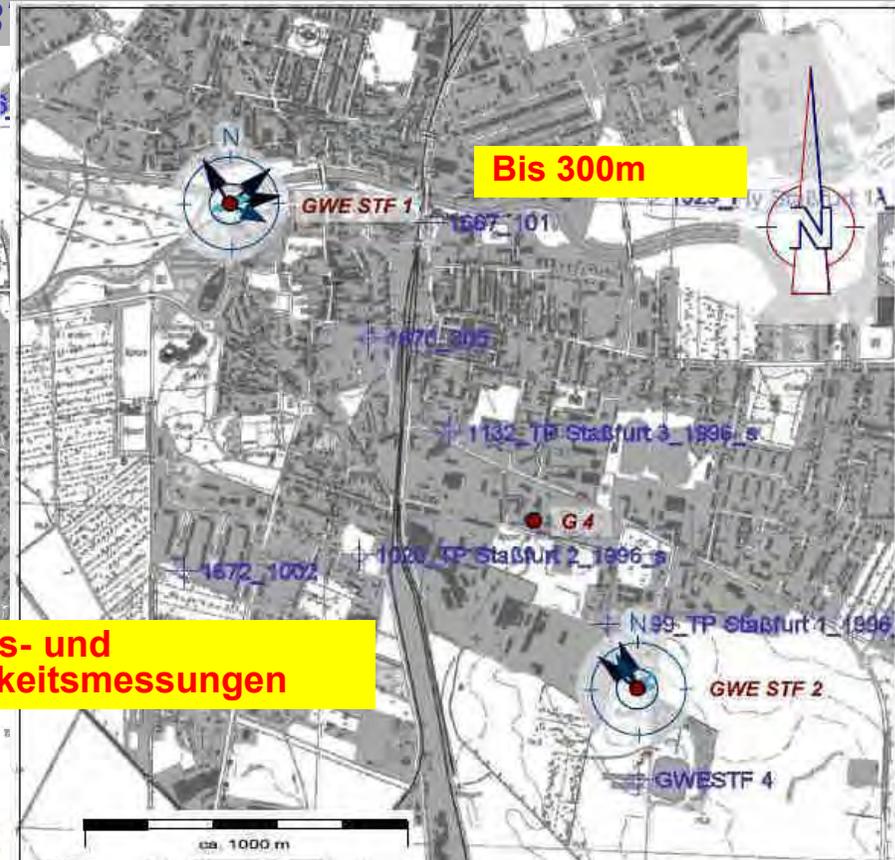
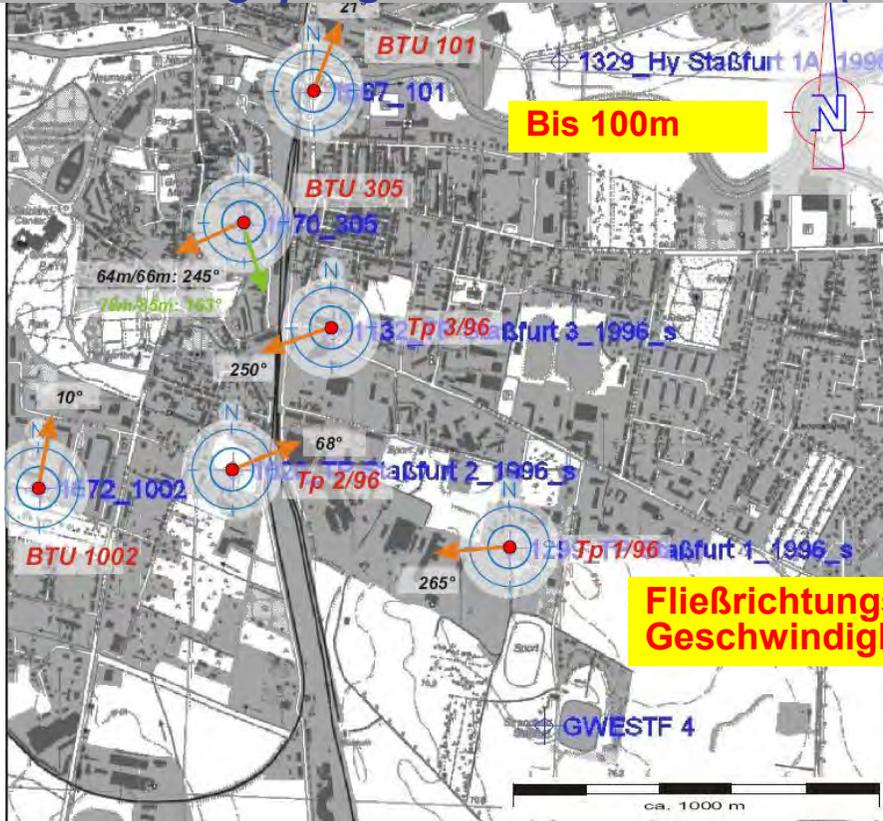
Forschungsverbund
Dynamik abgeöffneter oder
gefluteter Salzbergwerke
und ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Forschungsprogramm Grundwasser (B)



9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Digitales Höhenmodell

Befliegungen 2000, 2007 und
2009

Höhendifferenzkarte aus
LIDAR-Messungen

Geomorphologische
Interpretation

Tektonische Interpretation



Senkungsgebiet

Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



K-UTECH
SALT TECHNOLOGIES

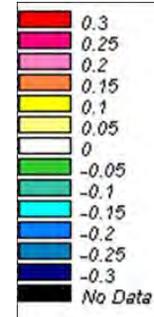
Höhendifferenzberechnung

Messeperioden 2007 - 2009

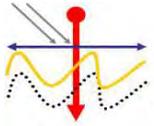


Senkungsgebiet

Legende (m)



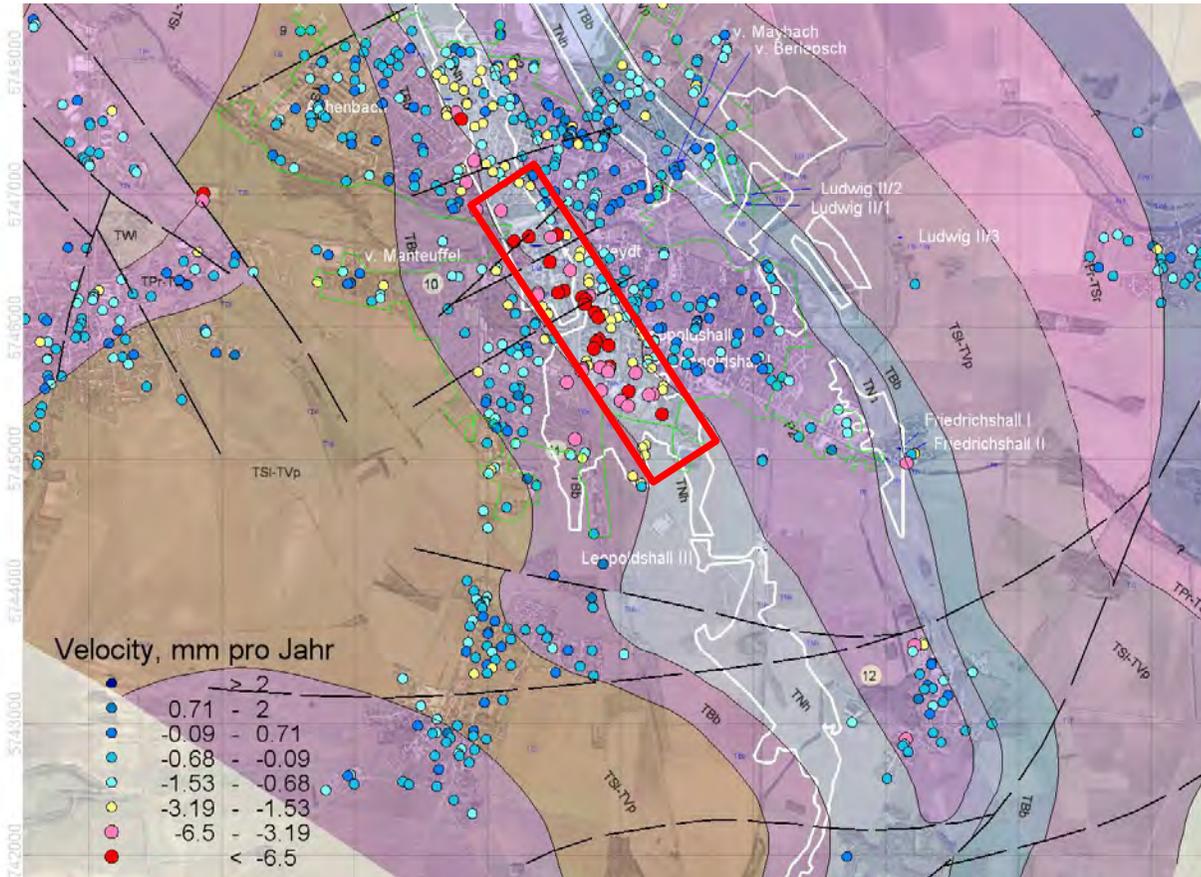
9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Forschungsverbund
Dynamik abgeöffneter oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Radarinterferometrie

Senkungsgeschwindigkeit



Senkungs-
gebiet

Autoren:

Dr. F. Kühn, BGR

DLR und TerraFirma

Kerner, T., BGR

Thormeier, IHU

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER

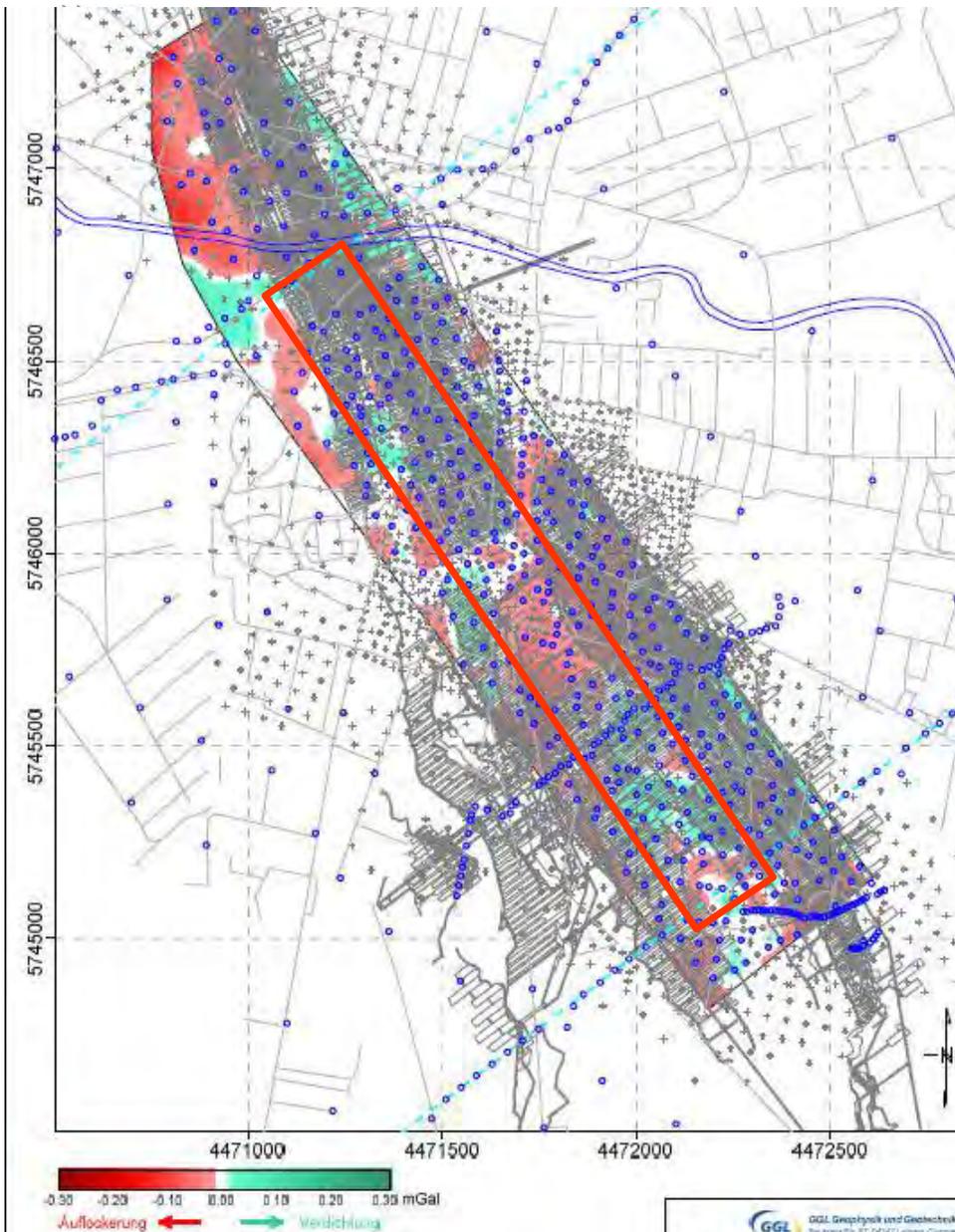
Forschungsprogramm

Geophysik (BGR):

Gravimetrische Karte des
Steißfurter Salzsattels

Gravimetrische Messungen
der Jahre 1977 und 2009
(gravimetrisches Monitoring)

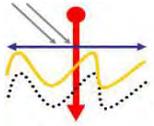
 Senkungsgebiet



Karlsruhe

 Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



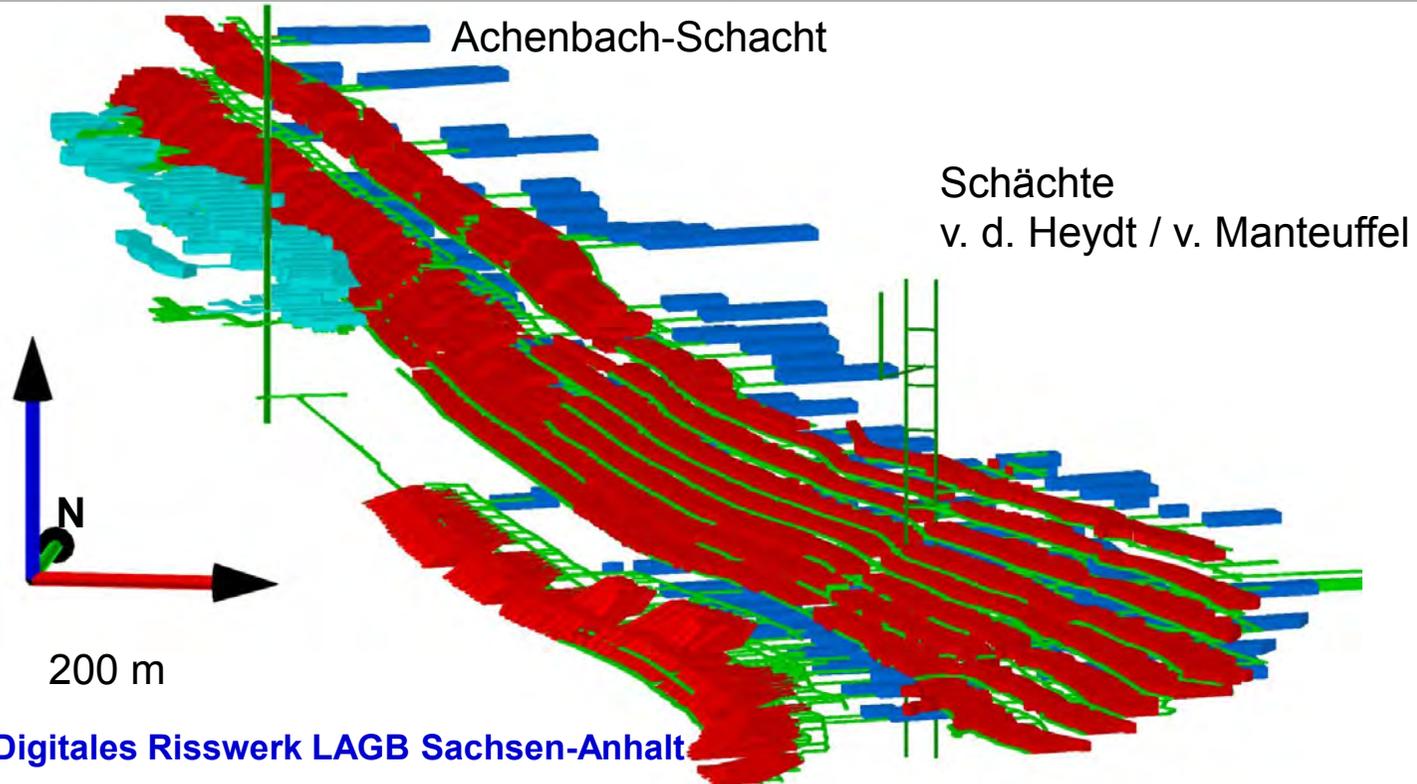
Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Forschungsprogramm 3D-Modellierung der Gruben (BGR, LAGB)

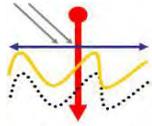


9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks

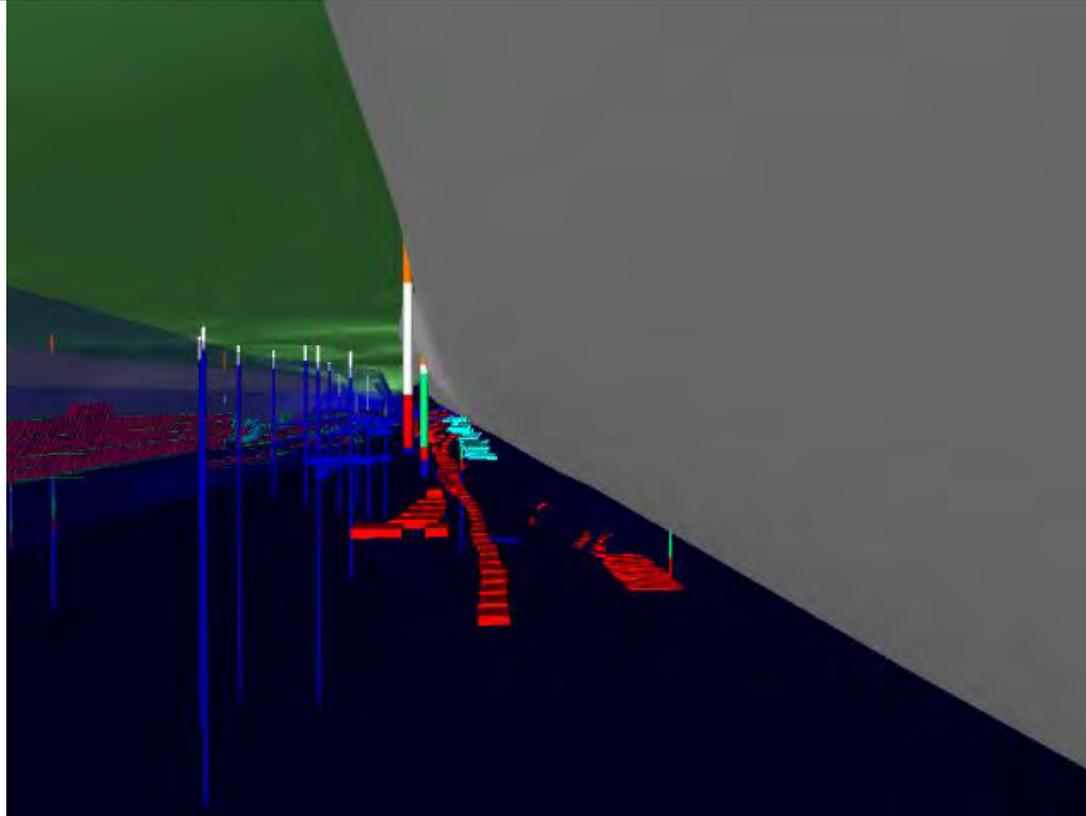


Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



KIT
Karlsruher Institut für Technologie

Forschungsprogramm 3D-Modellierung der Gruben (BGR, LAGB)

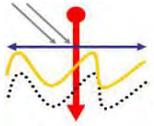


9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



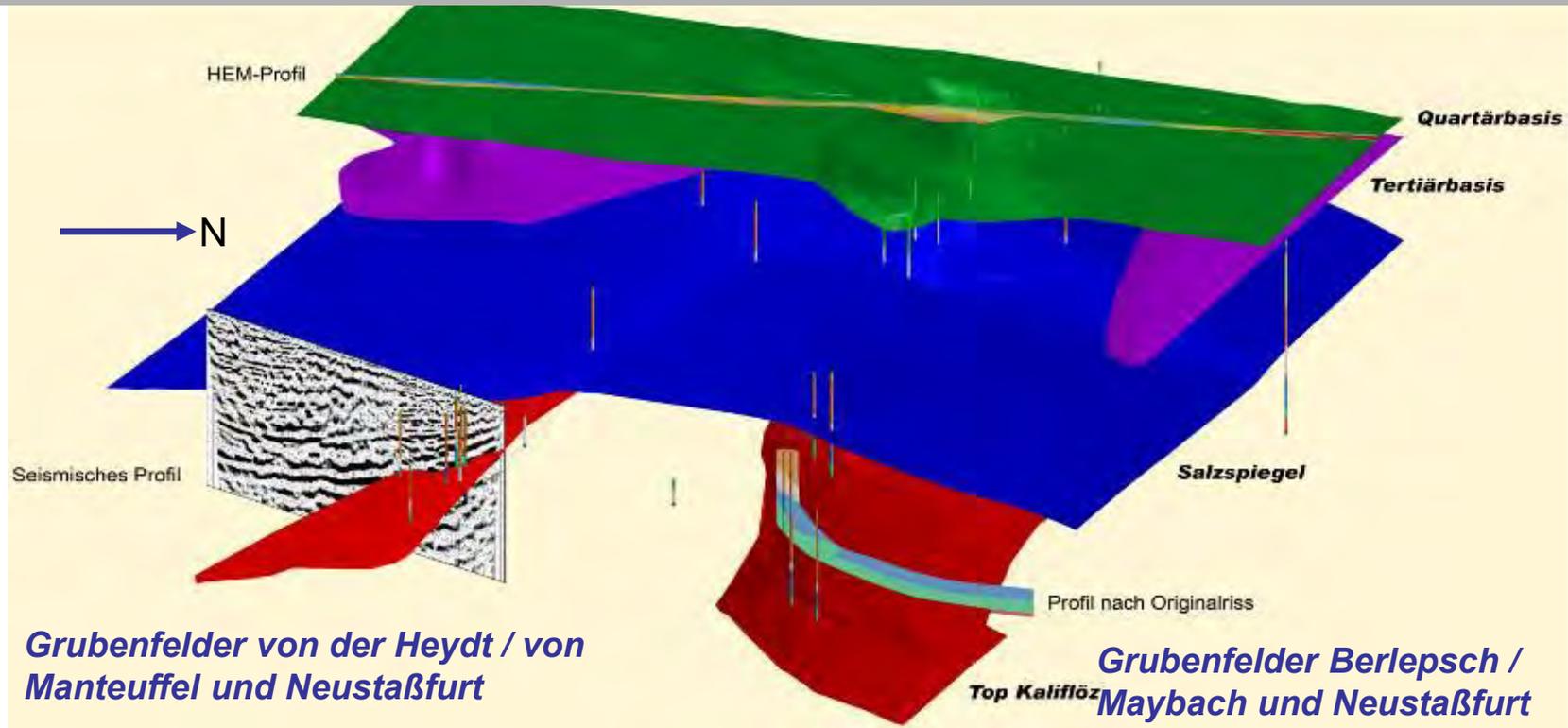
Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Forschungsprogramm Geologisches 3D-Modell (LIAG, BGR, LAGB)

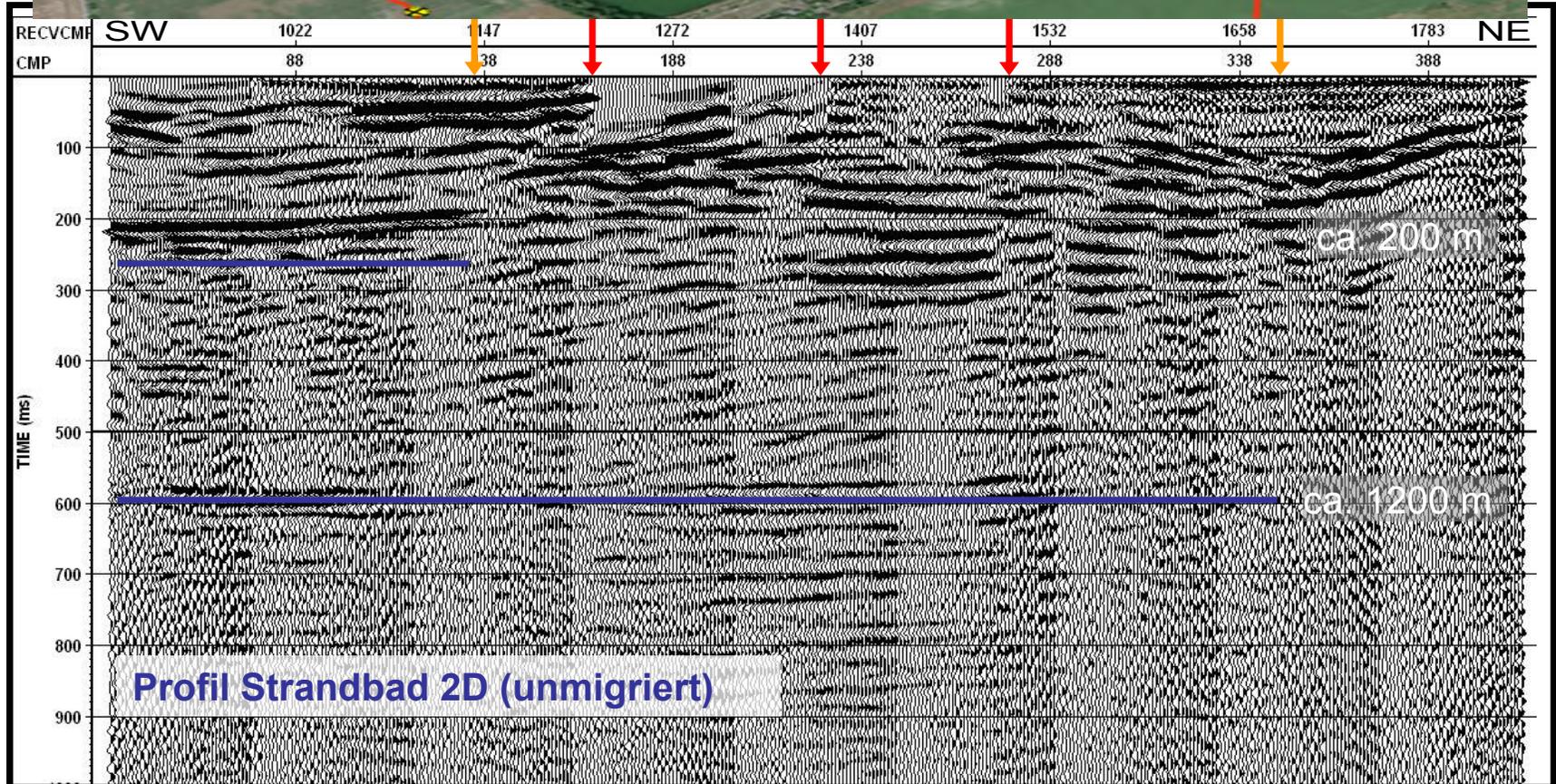


9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER

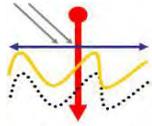


9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgeöffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



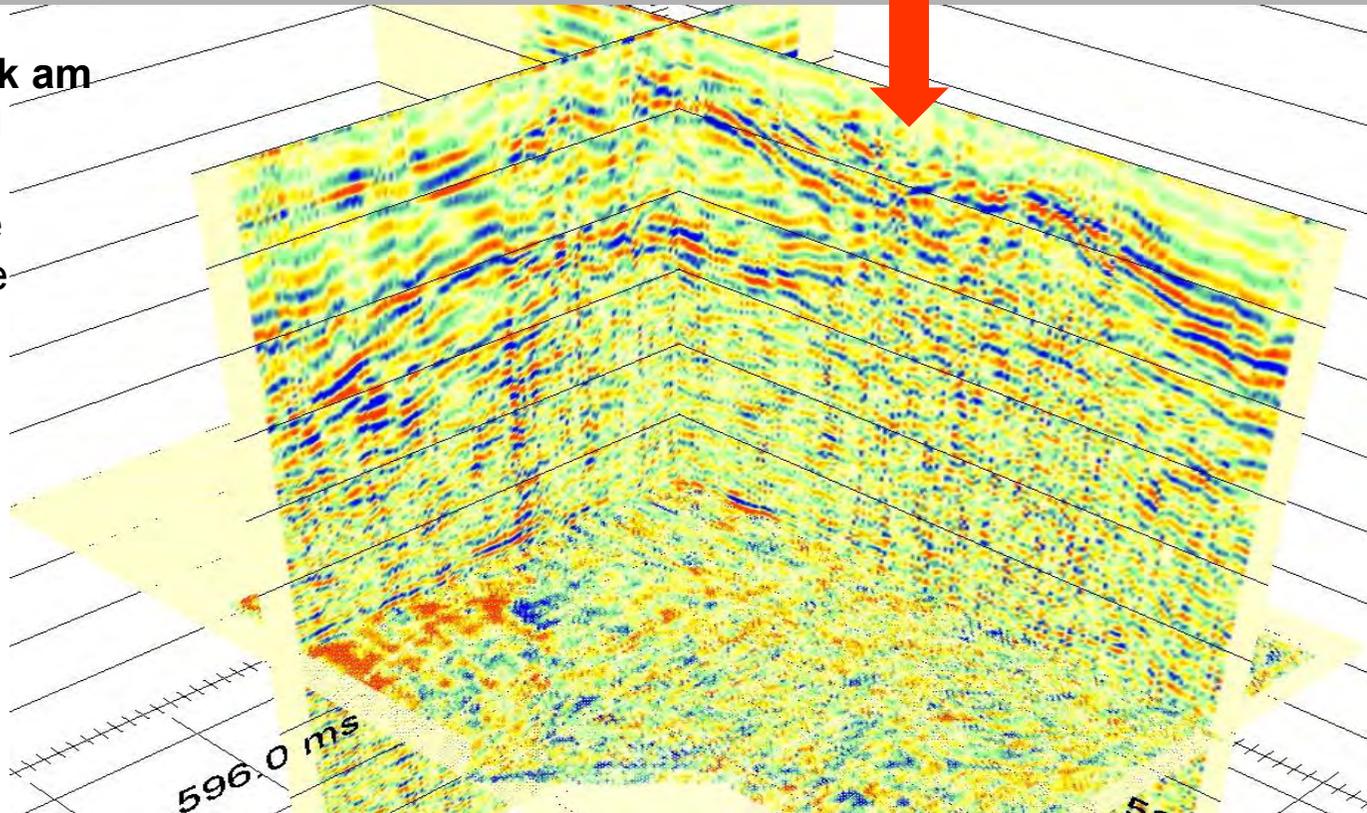
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



- Forschungsprogramm Seismik (LIAG, BGR)**

**3D-Seismik am
Strandbad**

unmigrierte
Zeitschnitte

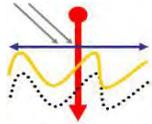


9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsprogramm Geomechanik (TU Clausthal)

FLAC3D 3.10

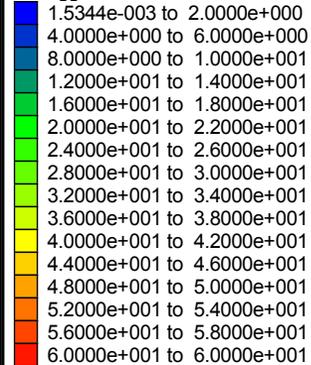
Step 279222 Model Perspective
15:08:41 Thu Jan 28 2010

Center:	Rotation:
X: 5.564e+002	X: 0.000
Y: 3.750e+000	Y: 0.000
Z: -1.372e+002	Z: 0.000
Dist: 2.769e+003	Mag.: 1.95
	Ang.: 22.500

Contour of Displacement Mag.

Magfac = 1.000e+000

Exaggerated Grid Distortion

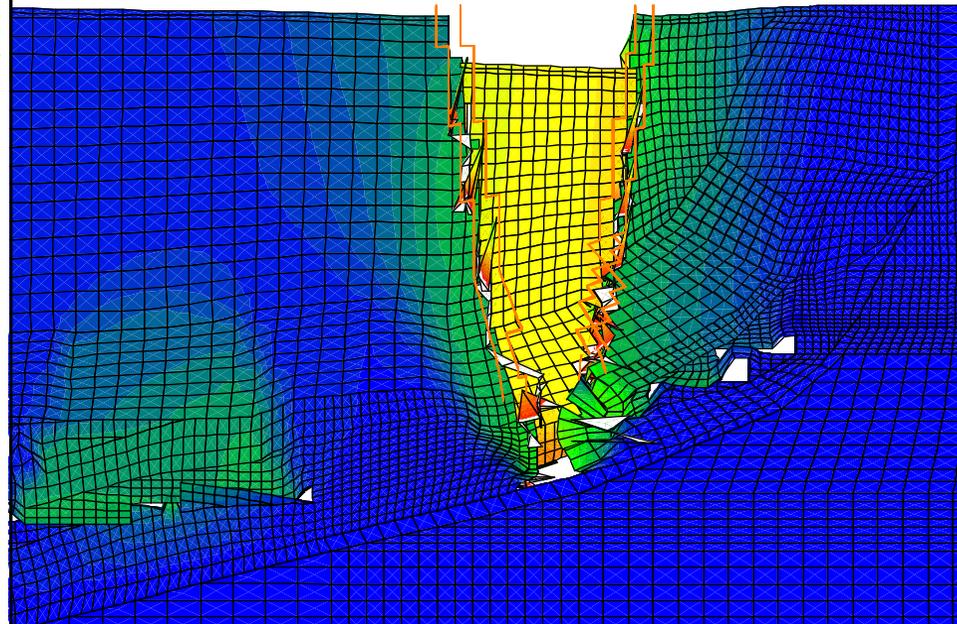


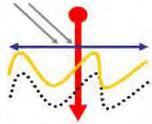
Interval = 2.0e+000

Interface Locations

TU-Clausthal
Deponietechnik und Geomechanik

Numerische Simulationen Strandbad





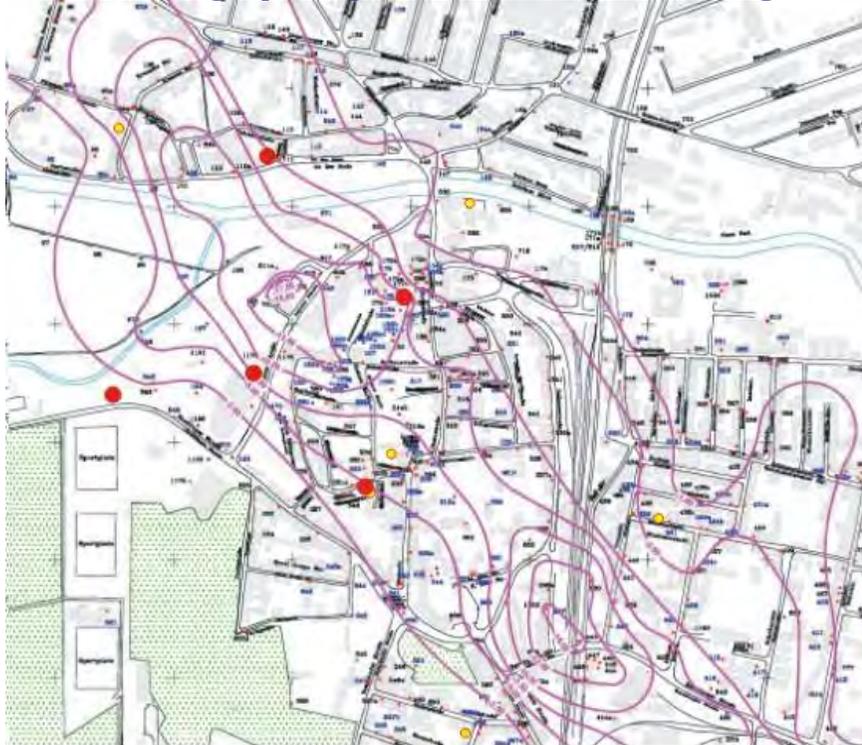
Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Forschungsprogramm Seismologisches Monitoring (BGR)



Senkungsgebiete (2004-2006)

Geplante Stationen (kontinuierliche Registrierung)

Existierende Stationen (getriggerte Registrierung)

Bis heute konnten mit dem Stationsnetz der BGR keine Bruchvorgänge festgestellt werden.

Das Detektionsvermögen des Messnetzes ist limitiert durch die starke Bodenunruhe in Staßfurt.

Ein nanoseismische Monitoring wurde speziell für die Detektion sehr schwacher Ereignisse entwickelt (Joswig, Uni Stuttgart) ist besser als die Feststationen

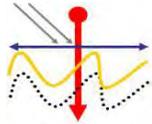
Alternative: 3-Komponentengeophone
In Tiefbohrungen am Neumarkt und Leopoldshall

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



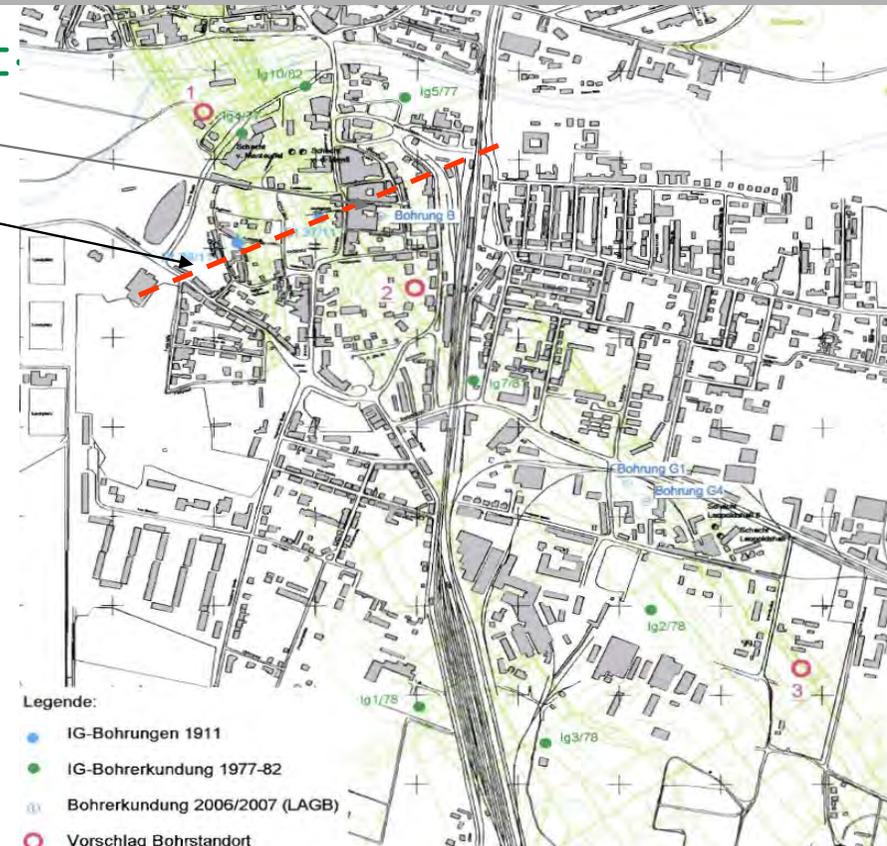
Forschungsprogramm Geomechanik (TU Clausthal)

Stand der Arbeiten: Profil C

Bohrung B

Profil II \approx (C - C)

- Nachrechnung des Absenkungsgeschehens im Profil mit Anwendung laborativ ermittelter Materialparameter
- Sensitivitätsanalyse mit Parametervariation im Rahmen der Streubreiten (Einfluss der Materialparametervariation auf die Absenkungsentwicklung)

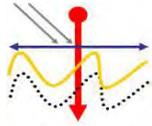


9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Karlsruher Institut für Technologie

Forschungsprogramm Geomechanik (TU Clausthal)

Schlussfolgerungen:

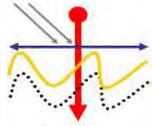
- **Entwicklung der Oberflächenabsenkungen, Maximum und Form der Mulde sind stark von den Materialeigenschaften des Untergrundes abhängig.**
- **Prognose: In dem Profil sind keine weiteren Bruchgeschehen zu erwarten (vollständig konvergierte Abbauhohlräume), bzw. sind zukünftige Senkungen wesentlich auf den hydraulisch bedingten Abtransport von Salzgestein zurückzuführen.**

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Karlsruher Institut für Technologie

Was wurde erreicht ?

Insgesamt liegt heute ein vollständig neuer geowissenschaftlicher Kenntnisstand für das Arbeitsgebiet Staßfurt vor:

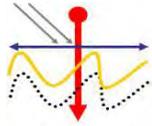
- Hydrogeologische, hydrochemische und hydrodynamische Verhältnisse und die relativen Alter der Grundwasserstockwerke konnten bestimmt werden.
- Die Transportmodelle werden mit ermittelten Kennwerten gerechnet.
- Grubenbaue in Staßfurt sind vollständig modelliert.
- Bohrungen und Seismik belegen Versatz bzw. Verbrauch von Grubenteilen
- Tagesbruch im Strandbad kann erklärt werden.
- Gebirgsmechanische Situation im Senkungsgebiet ist gerechnet und bewertet.
- Lagerungsverhältnisse von Salinar und Deckgebirge sind erfasst.
- Bislang unbekannte Quartärrinne wurde modelliert.
- Das Untersuchungsinstrumentarium wurde erprobt, Methoden neu- bzw. weiterentwickelt.
- Übertragbarkeit wurde in aktuellen Bergschadengebieten Sachsen-Anhalts erprobt.

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



Was bleibt noch zu tun?

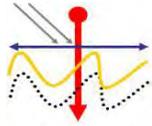
- **Abschließende Bewertung der gravimetrischen Messungen im Senkungsgebiet**
- **Auswertung hydrodynamischer Kennwerte in den Tiefbohrungen STF1 und 2**
- **Einspeisen der gewonnenen Daten und finale Berechnung des Strömungs- und Stofftransportmodells**
- **Verfeinerung des geologischen 3D-Modells und des Grubenmodells**
- **Erstellung einer Prognose für die zukünftige Entwicklung der Senkungsgebiete**
- **Abschlussveranstaltung vom 18. - 20. November 2010 in Staßfurt**
Anmeldung im Internet unter www.bgr.bund.de/stassfurt2010

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe



Bundesanstalt für
Geowissenschaften
und Rohstoffe

GEOZENTRUM HANNOVER



Forschungsverbund
Dynamik abgesoffener oder
gefluteter Salzbergwerke und
ihres Deckgebirgsstockwerks



**Herzlichen Dank
für Ihre Aufmerksamkeit
und
Auf Wiedersehen in Staßfurt**

9. Projektstatusgespräch 15. – 16.06.2010 in Karlsruhe





Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen

9. Projektstatusgespräch

Karlsruher Institut für Technologie
Fortbildungszentrum für Technik und Umwelt
15. – 16. Juni 2010

Veranstaltungsort

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Fortbildungszentrum für Technik und Umwelt
Campus Nord
Hermann-von-Helmholtz-Platz 1
76344 Eggenstein-Leopoldshafen

Weitere Informationen erhalten Sie unter



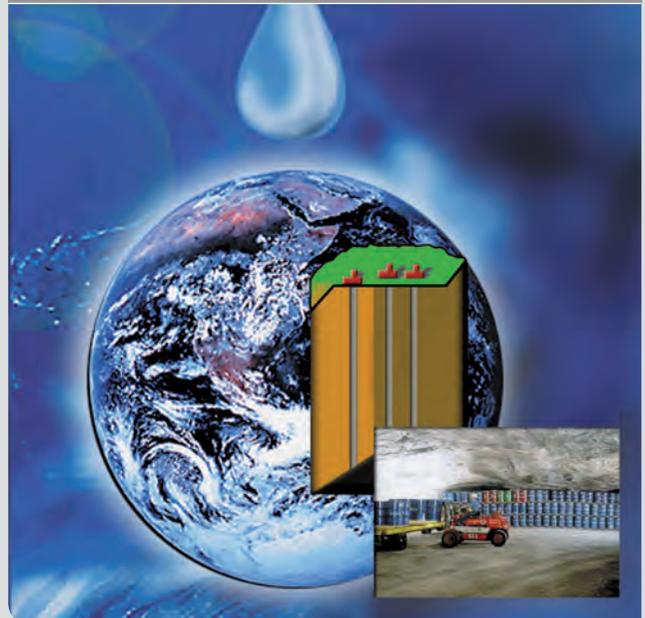
Wassertechnologie und Entsorgung
Postfach 3640
76021 Karlsruhe

Telefon: 07247 82-5791 oder -5788
Fax: 07247 82-7791
E-Mail: ellen.ernst@kit.edu
walter.steininger@kit.edu

www.ptka.kit.edu

www.kit.edu

PROJEKTRÄGER KARLSRUHE
WASSESTECHNOLOGIE UND ENTSORGUNG (PTKA-WTE)



KIT – Universität des Landes Baden-Württemberg und
nationales Forschungszentrum in der Helmholtz-Gemeinschaft

www.kit.edu



PROGRAMM

Dienstag 15. Juni 2010

- 13 00 **Begrüßung**
A. Kurz, Vizepräsident, Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
- 13 15 **Weiterentwicklung des Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Salzgestein am Beispiel des Standortes Gorleben**
J. Krone, DBE TECHNOLOGY GmbH
- 14 00 **Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern – Abschluss des Projektes DENKMAL**
W. Filbert, DBE TECHNOLOGY GmbH
- 14 45 **Referenzkonzept für die Endlagerung Wärme entwickelnder radioaktiver Abfälle in Tongestein (ERATO)**
W. Bollingerfehr, DBE TECHNOLOGY GmbH
- 15 30 Kaffeepause
- 16 00 **Untersuchungen zum THM-Verhalten von Steinsalz und Tonstein mit Schwerpunkt EDZ**
K. Wieczorek, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH
- 16 30 **Vergleich aktueller Stoffgesetze für Steinsalz anhand von 3D-Modellberechnungen**
A. Hampel, Wissenschaftlicher Berater
- 17 00 **Heterogene Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag – Untersuchung und Modellierung von MgO-Beton und Asphalt**
H. Konietzky, TU Bergakademie Freiberg
- 17 30 **BMBF-Förderbereich „Nukleare Sicherheitsforschung“**
H. Pitterich, Projektträger Karlsruhe
- 18 30 **Empfang**

Mittwoch 16. Juni 2010

- 09 00 **Modellierung thermohaliner Strömungen in geklüftet-porösen Medien**
G. Wittum, Goethe-Universität Frankfurt
- 09 30 **Verbundprojekt THEREDA – Entwicklung einer thermodynamischen Referenzdatenbasis zur Beschreibung von geochemischen Prozessen in Untertagedeponien und Endlagern für radioaktive Abfälle**
H. Moog, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH
- 10 00 **Verbund Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung und Sorption von Actiniden**
S. Krüger, TU München
- 10 30 Kaffeepause
- 11 00 **Zerstörungsfreie Permeabilitätsmessung**
Th. Wilsnack, IBeWa-Ingenieurpartnerschaft
- 11 30 **Eignungsuntersuchung von Bentonit/Sand-Gemischen als Verschlussmaterial im Tonendlager**
T. Rothfuchs, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH
- 12 00 **Verbundprojekt Staßfurt II – Prozessanalyse und Prognose für Bergschadensgebiete**
J. Gerardi, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR)
- 12 30 **Schlusswort**
- 13 15 Bustransfer zum Hauptbahnhof Karlsruhe