

**Die vereinfachte
Berechnung der
Konvergenzrate
salzgrusverfüllter
Hohlräume im
Steinsalz**

Die vereinfachte Berechnung der Konvergenzrate salzgrusverfüllter Hohlräume im Steinsalz

Martin Navarro

März 2013

Anmerkung:

Das diesem Bericht zu Grunde liegende FE-Vorhaben 3609 R 03210 „Forschung und Entwicklung zum Nachweis der Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern“ wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

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

Deskriptoren

Endlagerung, Kompaktion, Konvergenz, Konvergenzansatz, Salzgrus, Steinsalz

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit im Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 3609R03210 des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) beschäftigt sich mit verschiedenen Methoden zur vereinfachten Berechnung der Konvergenzrate salzgrusversetzter Hohlräume in Steinsalz. Die Arbeit befasst sich schwerpunktmäßig mit dem von Stelte entwickelten Konvergenzansatz und den darauf aufbauenden Weiterentwicklungen. Im Fokus stehen die physikalischen Grundlagen der Konvergenzansätze. Es werden modellspezifische Limitierungen der Ansätze diskutiert und Möglichkeiten der Weiterentwicklung aufgezeigt. Daneben wird ein alternativer Konvergenzansatz vorgestellt, der es ermöglicht, unabhängige Stoffgesetze für die Konvergenz des Grubenhohlraumes und die Kompaktion des Salzgrusversatzes vorzugeben.

Abstract

Within the research and development project 3609R03210 of the German Federal Ministry for the Environment, Nature Conservation and Nuclear Safety, different methods were investigated, which are used for the simplified calculation of convergence rates for mining cavities in salt rock that have been backfilled with crushed salt. The work concentrates on the approach of Stelte and on further developments based on this approach. The work focuses on the physical background of the approaches. Model specific limitations are discussed and possibilities for further development are pointed out. Further on, an alternative approach is presented, which implements independent material laws for the convergence of the mining cavity and the compaction of the crushed salt backfill.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Zielsetzung	1
2	Der Konvergenzansatz von Stelte	5
3	Der erweiterte Stelte-Ansatz	11
4	Probleme der Konvergenzansätze nach Stelte.....	17
5	Lösungsansätze.....	21
5.1	Bildung von Temperatur-Feuchte-Klassen.....	21
5.2	Ansatz mit unabhängigen Materialgesetzen für Gebirge und Versatz	24
6	Diskussion	31
7	Zusammenfassung und Ausblick	35
	Dank.....	39
	Literaturverzeichnis.....	41
	Abbildungsverzeichnis.....	45
	Tabellenverzeichnis.....	47

1 Einleitung und Zielsetzung

Steinsalz gehört in Deutschland zu den in Frage kommenden Wirtsgesteinen für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in großer Tiefe. Das Material Steinsalz zeichnet sich durch eine hohe Kriechfähigkeit aus. Das Kriechen des Salzes verkleinert die durch das Endlagerbergwerk geschaffenen Hohlräume, ein Vorgang, der *Konvergenz* genannt wird. Die Konvergenz des Gebirges führt zu einer Kompaktion des Materials, mit dem die Hohlräume verfüllt (versetzt) wurden. In Endlagerkonzepten für das Wirtsgestein Steinsalz wird üblicherweise auch Salzgrus als Versatzmaterial vorgesehen, denn dieses kompaktiert so stark, dass es langfristig die Funktion eines hydraulischen Verschlusses übernehmen kann. Dieser Vorgang benötigt Zeit, weshalb die technische Barriere des Salzgrusversatzes durch kurzfristig wirkende technische Verschlüsse ergänzt wird.

In den Porenräumen des Versatzes befinden sich in der Regel eine Gasphase und evtl. auch eine Flüssigkeitsphase.¹ Die konvergenzbedingte Kompaktion des Salzgrusversatzes ist deshalb ein Prozess, bei dem hydraulische und mechanische Vorgänge miteinander in Wechselwirkung treten. Die Versatzkompaktion erhöht beispielsweise den Porendruck, wodurch Fließvorgänge ausgelöst werden. Durch die Veränderung des Porenraumes können sich auch die Kapillardrücke und relativen Permeabilitäten ändern. Der Porendruck wiederum stützt den versetzten Hohlraum und verlangsamt damit die Konvergenz des Gebirges und die Versatzkompaktion. Bei fluiddynamischen Berechnungen, die in Langzeitsicherheitsanalysen zur Analyse des Transports von Gas, Lauge oder Radionukliden benötigt werden, muss dieser hydromechanisch gekoppelte Prozess der Konvergenz und Kompaktion zwingend mit berücksichtigt werden.

Angesichts der Rechenleistung heutiger Computer ist dies häufig nur in vereinfachter Weise möglich. Dies trifft insbesondere dann zu, wenn viele Rechenläufe durchgeführt werden sollen oder Modellgebiete mit vielen Gitterelementen betrachtet werden. Die vereinfachte Berücksichtigung der Konvergenz und Kompaktion erfolgt oft über die

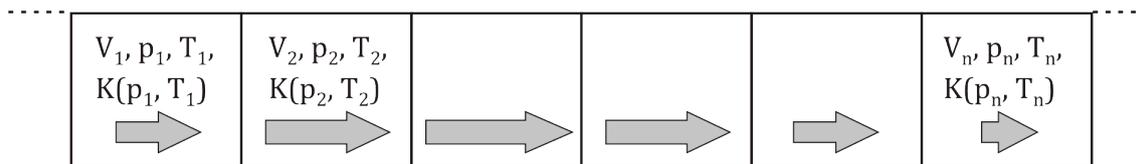
¹ Dies trifft auf Sicherheitskonzepte zu, die keine Flutung des Endlagerbergwerkes vorsehen, sondern allenfalls den Zutritt sehr geringer Lösungsmengen zu den Abfällen erlauben. Diese Sicherheitskonzepte werden allen folgenden Überlegungen zu Grunde gelegt.

Erfassung der relativen zeitlichen Änderung des Hohlraumvolumens – der Konvergenzrate also. In der Regel beschreibt man die zeitliche Veränderung des Hohlraumvolumens V über die Differenzialgleichung

$$\frac{d}{dt}V(t) = -K \cdot V(t), \quad (1.1)$$

wobei K als *Konvergenzrate* bezeichnet wird. Eine Gleichung zur vereinfachten Berechnungen der Konvergenzrate K wurde in der Vergangenheit oft „Konvergenzansatz“ genannt, was auch im vorliegenden Bericht geschehen soll.

Salzgrus kompaktiert aufgrund von Kornverschiebung, Kornzertrümmerung und Korndeformation, die durch Versetzungsklettern oder Umlöseprozesse hervorgerufen wird /KRÖ 09/. Wesentlichen Einfluss auf diese Prozesse haben nach Kröhn et al. /KRÖ 09/ die Mineralogie des Salzgruses, die Kornverteilung, die Kompaktionsgeschwindigkeit, die Temperatur, die Materialfeuchte und der Spannungszustand. Der Konvergenzansatz versucht diese Einflüsse zu erfassen, indem er die Konvergenzrate K als Funktion $p, \phi, T, \dots \mapsto K$ verschiedener Zustandsgrößen wie etwa des Porendrucks p , der Porosität ϕ oder der Temperatur T beschreibt. Fluiddynamische Berechnungen mit Hilfe des Konvergenzansatzes erfolgen oft im Rahmen eindimensionaler Betrachtungen von Grubenhohlräumen, wobei die lokale Konvergenzrate aus den lokal herrschenden Bedingungen abgeleitet wird (Abb. 1.1).



$$dV_i/dt = -K V_i$$

Abb. 1.1 Eindimensionales Modellgitter einer mit Salzgrus verfüllten Strecke zur Illustration einer typischen Anwendung des Konvergenzansatzes

Jedes Gitterelement (Kästen) besitzt ein Volumen V_i und einen Druck- und Temperaturzustand (p_i, T_i) . Durch diesen Zustand ergibt sich für jedes Gitterelement eine eigene Konvergenzrate $K(p_i, T_i)$, welche über die Gleichung $dV_i/dt = -K V_i$ die zeitliche Änderung des Elementvolumens steuert. Die Volumenänderung erzeugt eine Porositäts- und Druckänderung, so dass sich Wechselwirkungen zwischen Konvergenz und Fluidfluss (Pfeile) ergeben.

Die Kalibration des Konvergenzansatzes erfolgt in der Regel durch eine Kalibrierung an Konvergenzmessungen oder an den Ergebnissen gebirgsmechanischer Simulationen des gekoppelten Konvergenz-Kompaktions-Prozesses. Für den Parameterraum, in dem eine Kalibrierung stattgefunden hat, gründet sich das Vertrauen in den Konvergenzansatz auf die Qualität der Kalibrierung und die zu Grunde liegende Datenbasis. Die Datenbasis – und damit der Parameterraum der Kalibrierung – deckt aber nur einen Teil der möglichen Zustände und Entwicklungen ab, die in einem Endlager auftreten können. Somit stellt sich die Frage, ob der kalibrierte Konvergenzansatz auch abseits des Parameterraumes der Kalibrierung verlässliche Prognosen für den Konvergenzvorgang liefern kann.

Zur Klärung dieser Frage kann man verifizierbare Prognoserechnungen („blind predictions“) durchführen. Dies erfolgte zum Beispiel im EU-Projekt PAMINA im Rahmen einer Benchmark-Übung, welche eine gute Prognosefähigkeit des verwendeten Konvergenzansatzes bestätigte /BUH 09/. Aber auch Prognoserechnungen wie diese überspannen nur einen Teil der in einem Endlager möglichen Zustände und Entwicklungen. Insofern ist für das Vertrauen in die Prognosefähigkeit eines Konvergenzansatzes wichtig, wie sehr man von ihm annehmen kann, dass er die kausalen physikalischen Zusammenhänge mit ausreichender Genauigkeit beschreibt. Einem Konvergenzansatz, dem ein plausibles physikalisches Modell zu Grunde liegt, wird man bei gleichem Verifikationsgrad eine Prognose eher zutrauen als einem Modell, das rein phänomenologischer Natur ist.

Die vorliegende Arbeit, die im Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 3609R03210 des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) durchgeführt wurde, beschäftigt sich mit verschiedenen Konvergenzansätzen, die zur vereinfachten Berechnung der Konvergenzrate salzgrusversetzter Hohlräume in Steinsalz verwendet werden. Sie befasst sich dabei schwerpunktmäßig mit dem von Stelte /STE 85/ entwickelten Konvergenzansatz und den darauf aufbauenden Weiterentwicklungen /NOS 05/, die in die Codes LOPOS /BUH 09, HIR 99/, MARNIE /MAR 96, MAR 02/ und TOUGH2 /NAV 13/ implementiert worden sind. Im Fokus stehen die physikalischen Modelle, die den Konvergenzansätzen zu Grunde liegen. Es werden die modellspezifischen Limitierungen der Ansätze diskutiert und Möglichkeiten der Weiterentwicklung aufgezeigt. Es wird ein alternativer Konvergenzansatz vorgestellt, der es ermöglicht, unabhängige Stoffgesetze für die Konvergenz des Gebirges und die Kompaktion des Versatzes vorzugeben. Grundlage dieses Konvergenzansatzes ist das Stoffgesetz für Salzgrus von Zhang /ZHA 93/.

Kapitel 2 stellt zunächst den Konvergenzansatz von Stelte vor und weist auf verschiedene Limitierungen dieses Ansatzes hin. Kapitel 3 beschreibt den von Noseck et al. /NOS 05/ erweiterten Stelte-Ansatz. Spezifische Probleme der Konvergenzansätze nach Stelte werden in Kapitel 4 diskutiert. Kapitel 5 zeigt verschiedene Lösungsansätze auf, zu denen auch der in diesem Vorhaben entwickelte alternative Konvergenzansatz gehört. In Kapitel 6 werden die Relevanz der Ergebnisse für die Langzeitsicherheitsanalyse bewertet und Möglichkeiten der Weiterentwicklung diskutiert. Eine Zusammenfassung und ein Ausblick finden sich in Kapitel 7.

2 Der Konvergenzansatz von Stelte

Im Jahr 1985 stellte Stelte im Rahmen des Vorhabens „Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung“ (PSE) /STE 85/ einen Ansatz zur Beschreibung der konvergenzbedingten Kompaktion salzgrusgefüllter Hohlräume in einem salinaren Endlager vor. Dieser Ansatz wurde im gleichen Vorhaben auch in /BRÜ 85/ dargestellt, allerdings ohne Herleitung und mit einer Formelkorrektur. In diesem Bericht wird auch zum ersten Mal der Begriff „Konvergenzansatz“ verwendet. Der Konvergenzansatz von Stelte wird teilweise nach dem Vorhabensakronym auch „PSE-Ansatz“ genannt /RÜB 10/.

Der Konvergenzansatz von Stelte beschreibt den Konvergenz-Kompaktions-Prozess durch eine mechanische Kopplung von Gebirge und Versatz unter dem Einfluss eines hydraulischen Porendruckes. Die Kopplung erfolgt über die Normalspannung auf der Hohlraumkontur (die Grenzfläche zwischen Gebirge und Versatz) bei Annahme, dass die Volumenänderung des Hohlräumens gleich der Änderung des Versatzporenvolumens ist. Der Ansatz von Stelte beinhaltet einige, teilweise stark vereinfachende Annahmen, die nachfolgend aufgezeigt werden.

Stelte /STE 85/ führt aus, dass die Konvergenzrate eines neu aufgefahrenen Hohlräumens im Steinsalz einem stationären Wert entgegenstrebt. Wegen der oftmals langen Standzeit der Grubenhohlräume nimmt er an, dass dieser stationäre Wert zum Zeitpunkt der Verfüllung näherungsweise erreicht sei. Damit könne die Konvergenzrate durch eine Gleichung für das stationäre Kriechen beschrieben werden:²

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = C(T) \left(\frac{p_G - p_0}{1 \text{ MPa}} \right)^m \quad (2.1)$$

In dieser Gleichung ist V das Volumen des Hohlräumens, p_0 der Druck auf der Hohlraumkontur und p_G der Gebirgsdruck in weiter Entfernung zum Hohlraum.

² Abweichend von der Darstellung in /STE 85/ wurde hier und im Folgenden ein Referenzdruck von 1 MPa eingeführt, um einen dimensionslosen Term zu erhalten.

Die temperaturabhängige Funktion $C(T)$ lautet

$$C(T) = -K_{\text{ref}} \left(\frac{p_G}{1 \text{ MPa}} \right)^{-m} \exp \left(-\frac{Q}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_G} \right) \right), \quad (2.2)$$

wobei K_{ref} die Konvergenzrate ist, die sich unter den Referenzbedingungen $T = T_G$ und $p_0 = 0$ einstellt. Weiterhin ist Q die Aktivierungsenergie des Steinsalzes und R die universelle Gaskonstante.

Bei diesem Ansatz werden alle Spannungen als isotrop angenommen, weshalb hier auch von Drücken gesprochen werden kann. Auch wird von einer Homogenität der Spannungen sowohl im Versatz als auch im weit entfernten Gebirge ausgegangen, wodurch p_0 und p_G erst sinnvolle physikalische Größen werden.

Gleichung (2.2) wurde für homogene Temperaturen entwickelt. Stelle /STE 85/ nimmt an, dass bei einem in situ vorhandenen Temperaturgradienten Mittelwerte gebildet werden müssten. Die Temperaturen in Gleichung (2.2) stellen also repräsentative oder effektive Temperaturen dar. Wegen der hohen Sensitivität der Kriechraten gegenüber Temperaturänderungen ist die Frage nach der physikalischen Bedeutung dieser Temperaturen und ihrer grundsätzlichen Bestimmbarkeit von großer Relevanz.

Gleichung (2.2) entspricht dem z. B. in /HUN 99/ dargestellten Stoffgesetz BGRa zur Beschreibung des temperaturabhängigen sekundären Kriechens von Steinsalz. Die Übertragbarkeit dieses Stoffgesetzes auf Gebirgshohlräume lässt sich laut Stelle für zylindrische und sphärische Hohlräume direkt ableiten, worauf auch Hirsekorn & Tix /HIR 96/ hinweisen. Die Konvergenzraten dieser beiden Hohlraumformen unterscheiden sich um einen konstanten Faktor. Im Allgemeinen können also die Konvergenzraten für verschiedene Hohlraumformen nicht mit demselben Parameterwert für K_{ref} in Gleichung (2.2) beschrieben werden.

Eine für die Herleitung des Konvergenzansatzes zentrale Annahme ist die, dass Gleichung (2.2) bei sphärischen Hohlräumen von der Porengröße unabhängig ist. Entsprechend wendet Stelle /STE 85/ diese Gleichung auch auf kleine isolierte Poren im Versatz an, wie sie im Zustand starker Versatzkompaktion vorliegen. Stelle leitet hieraus zunächst einen Konvergenzansatz für einen solchen stark kompaktierten Versatz ab, bevor er eine Verallgemeinerung für beliebige Kompaktionsgrade durchführt.

Eine isolierte Pore mit Volumen V_P und Porendruck p_H besitzt im Konvergenzansatz von Stelle die Konvergenzrate

$$\frac{1}{V_P} \frac{dV_P}{dt} = C(T) \left(\frac{p_F - p_H}{1 \text{ MPa}} \right)^m, \quad (2.3)$$

wobei p_F der in einiger Entfernung zur Pore herrschende Druck im Festkörper ist, analog zum Parameter p_G aus Gleichung (2.1). Der Porendruck p_H ist analog zum in Gleichung (2.1) verwendeten Druck auf der Hohlraumkontur p_0 .

Die Konvergenzrate ist, wie auch Stelle anmerkt, von der Hohlraumgeometrie abhängig. Die Gleichsetzung der Funktionen $C(T)$ in den Gleichungen (2.1) und (2.3) – wichtig für die Herleitung von Gleichung (2.6) – beruht unter anderem auf der Annahme gleicher Geometrie für Grubenhohlraum und Pore. Eine Anwendung des Konvergenzansatzes auf sich voneinander unterscheidende Poren- und Hohlraumgeometrien führt somit zu einer gewissen Inkonsistenz. Ferner bedeutet die beidmalige Verwendung von $C(T)$ die Näherung $p_F = p_G$ an dieser Stelle.

Eine Inkonsistenz ergibt sich auch bei einer Anwendung des Konvergenzansatzes auf inhomogene Temperaturfelder. Da in den Gleichungen (2.1) und (2.3) dieselbe Funktion $C(T)$ für die Poren- und Grubenraumskala verwendet wird, bedeutet dies, dass auch die in $C(T)$ verwendeten „mittleren“ Temperaturen dieselben sind. Dass aber dieselben Temperaturen sowohl auf der Skala der Poren als auch auf der Skala des Grubenraumes repräsentativ sind, wird bei inhomogenen Temperaturfeldern selten der Fall sein. Dies zeigt, dass der Konvergenzansatz von Stelle den Einfluss der Temperatur auf die Konvergenzrate im Allgemeinen nur für homogene Temperaturfelder konsistent beschreibt.

Mit Hilfe von Gleichung (2.3) bestimmt Stelle zunächst den Konvergenzansatz für den weitgehend kompaktierten Versatz folgendermaßen: Er leitet zunächst die Beziehung

$$p_0 = n p_H + (1 - n) p_F \quad (2.4)$$

für die Normalspannung p_0 auf der Hohlraumkontur ab, bei der n die Porosität des Versatzes darstellt ($n := \frac{V_P}{V}$).

Hiermit kann in Gleichung (2.1) die Variable p_0 substituiert werden, so dass man für die Konvergenzrate des Grubenhohlraums

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = C(T) \left(\frac{p_G - n p_H - (1 - n) p_F}{1 \text{ MPa}} \right)^m \quad (2.5)$$

erhält. In dieser Gleichung lässt sich p_F mit Hilfe von Gleichung (2.3) substituieren, sofern man annimmt, dass die Hohlraumreduktion der Porenraumreduktion entspricht, so dass

$$\frac{dV_P}{dt} = \frac{dV}{dt}$$

gilt. Es ergibt sich damit als Konvergenzansatz für sehr kleine Porositäten

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = C(T) \frac{n}{\left(1 + n^{\frac{1}{m}} - n\right)^m} \left(\frac{p_G - p_H}{1 \text{ MPa}} \right)^m \quad (2.6)$$

Die Verallgemeinerung für beliebige Versatzporositäten bedarf nun verschiedener Anpassungen. Nach Stelle /STE 85/ muss die Porosität n in Gleichung (2.4) durch eine „Flächenporosität“ \hat{n} ersetzt werden, da die Porosität bei größeren Werten den Flächenanteil der Poren auf der Hohlraumkontur nicht mehr korrekt wiedergibt. Die Flächenporosität $\hat{n}(n, n_0)$ ist dabei eine Funktion der Porosität n und der Anfangsporosität n_0 . Unter Verwendung der Flächenporosität wird Gleichung (2.4) zur Kopplung der Gebirgs- und Versatzdeformation zu

$$p_0 = \hat{n} p_H + (1 - \hat{n}) p_F \quad (2.7)$$

Für größere Porositäten interpretiert Stelle den Parameter p_F als die mittlere Normalspannung der Kornauflageflächen auf der Hohlraumkontur.

Stelle weist darauf hin, dass bei großen Porositäten und kleinflächigen Kornkontakten neben dem Kriechen auch andere Deformationsmechanismen auftreten können, wie etwa Kornzertrümmerung oder Umlöseprozesse. Auch müsse beim Versatz anders als beim makroskopischen Hohlraum (sofern dieser eine ausreichende Standzeit besitzt) von einer primären Kriechphase ausgegangen werden. Stelle argumentiert, dass diese Vorgänge zwar die Stützwirkung des Versatzes verringern, dass dies aber in der An-

fangsphase der Konvergenz zu vernachlässigen sei, weil die geringe Stützwirkung des Versatzes zu diesem Zeitpunkt nur wenig Einfluss auf die Konvergenz des Gruben-
hohlraums habe.

Bei der Betrachtung variabler Kompaktionsgrade beschränkt sich Stelte deshalb auf die Beschreibung des Einflusses der kleineren Kornkontaktflächen auf das Kriechen. Um diesen Einfluss zu erfassen, definiert er eine „Geometriefunktion“ $g(n, n_0)$. Die Geometriefunktion wird als Korrekturfaktor in Gleichung (2.3) eingeführt, so dass man für die Porenkonvergenz

$$\frac{1}{V_p} \frac{dV_p}{dt} = C(T) g(n, n_0) \left(\frac{p_F - p_H}{1 \text{ MPa}} \right)^m \quad (2.8)$$

erhält. Mit den Korrekturen durch die Flächenporosität und die Geometriefunktion lässt sich analog zur Herleitung von Gleichungen (2.6) nun ein Konvergenzansatz für beliebige Porositäten ableiten:

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = C(T) \frac{n g(n, n_0)}{\left(1 - \hat{n}(n, n_0) + [n g(n, n_0)]^{\frac{1}{m}} \right)^m} \left(\frac{p_G - p_H}{1 \text{ MPa}} \right)^m \quad (2.9)$$

Jetzt müssen nur noch $\hat{n}(n, n_0)$ und $g(n, n_0)$ charakterisiert werden, wobei für die Geometriefunktion $g(0, n_0) = 1$ gelten muss, um für vollständige Kompaktion auf Gleichung (2.6) zu kommen. Zur Bestimmung der beiden Funktionen verwendet Stelte ein stark idealisiertes Kornmodell bei dem die Kornspitzen Kegel darstellen, die sich durch den Kompaktionsprozess zu Zylindern verformen (Abb. 2.1). Er leitet aus diesen geometrischen Überlegungen die Beziehung

$$\hat{n}(n, n_0) = 2 \frac{n}{n_0} - \left(\frac{n}{n_0} \right)^2$$

für die Flächenporosität ab. Er argumentiert ferner, dass in dem gleichen Kornmodell für $n \rightarrow n_0$ die Beziehung $g(n, n_0) \sim 1 - n/n_0$ gelten müsse. Da ebenfalls $g(0, n_0) = 1$ gelten muss, erhält man für die Geometriefunktion den Ausdruck

$$g(n, n_0) = 1 - \frac{n}{n_0},$$

der nach Stelle die Geometriefunktion im gesamten Porositätsbereich unterschätzt. Stelle weist darauf hin, dass es sich bei dieser Geometriefunktion um eine grobe Abschätzungen handelt, zeigt aber durch eine Sensitivitätsanalyse und durch Vergleich mit numerischen Rechnungen, dass auch diese grobe Abschätzung der Funktionsverläufe akzeptable Approximationen erzeugen kann.

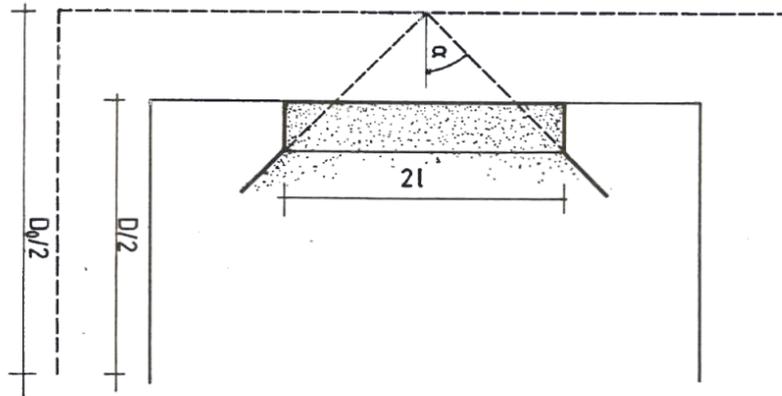


Abb. 2.1 Stark idealisiertes Kornmodell, das Stelle /STE 85/ zur Abschätzung der Flächenporosität und der Geometriefunktion verwendet

Das Korn befindet sich in einer kubischen Zelle, deren anfänglichen Ausmaße durch die gestrichelte Linie dargestellt sind. Die durchgezogenen Linien zeigen die Ausmaße nach einem Kompaktionsvorgang. Dargestellt ist nicht das Korn, sondern nur eine auf dem Zellenrand aufliegende Kornspitze, die zu Beginn Kegelgeometrie hat (gestrichelte Linien) und während der Kompaktion in einen Zylinder (gepunktete Fläche) umgewandelt wird.

3 Der erweiterte Stelte-Ansatz

Der Konvergenzansatz von Stelte wurde in der in /BRÜ 85/ dargestellten Form noch einige Jahre in den Programmen LOPOS und MARNIE verwendet, wobei lediglich eine Erweiterung des Temperaturterms stattfand /HIR 99, MAR 96, MAR 02/. Im BMWA-Vorhaben „Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern“ /NOS 05/ wurde der Konvergenzansatz von Stelte dann stärker weiterentwickelt.³ Dieser erweiterte Konvergenzansatz wird nachfolgend angesichts seines Ursprungs „erweiterter Stelte-Ansatz“ genannt. Darstellungen dieses Ansatzes finden sich auch in /BUH 09/ und /RÜB 10/.

Bereits in /BRÜ 85/ erfolgte eine Umstrukturierung der von Stelte abgeleiteten Gleichungen (2.9) in der Form

$$K := -\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = K_{\text{ref}} \cdot f_p \cdot f_\phi \cdot f_T, \quad (3.1)$$

bei der K_{ref} „Referenzkonvergenzrate“ genannt wird und die Faktoren f_p , f_ϕ und f_T Funktionen des Drucks p (Fluid- bzw. Porendruck im betrachteten Hohlraum bzw. im Versatzmaterial), der Porosität ϕ (im Versatzmaterial) und der Temperatur T (im Versatzmaterial und in der Gebirgsumgebung des Hohlraums) sind. Für den Referenzdruck und die Referenztemperatur, unter der die Referenzkonvergenzrate K_{ref} bestimmt wurde, nehmen die Funktionen f_p und f_T den Wert 1 an. Die Funktion f_ϕ geht gegen 1, wenn die Porosität gegen die Anfangsporosität geht, wenn also die Stützwirkung des Versatzes Null ist.

Die Konvergenzrate K wird in Gleichung (3.1) durch die Referenzkonvergenzrate K_{ref} und die relative Abweichung von dieser dargestellt. Die Einflüsse von Druck, Temperatur und Porosität, die diese Abweichung erzeugen, werden separiert und durch einzelne Faktoren beschrieben, so dass der Konvergenzansatz die Form eines Produktansatzes erhält.

³ Nach Information durch einen der Autoren wurden diese Entwicklungen im Wesentlichen durch Hirsekorn durchgeführt.

Die Idee, den Produktansatz (3.1) durch Hinzunahme neuer Faktoren zu erweitern, wurde schon früh verfolgt. Zeitweise wurde ein zusätzlicher Faktor f_{red} zur Berücksichtigung verschiedener Versatzmaterialien hinzugenommen /BRÜ 85, MAR 96, MAR 02/. Im oben genannten BMWA-Vorhaben /NOS 05/ wurde schließlich eine Funktion f_{loc} zur Beschreibung der Ortsabhängigkeit der Referenzkonvergenzrate und eine Funktion f_t zur Erfassung der Instationarität des Konvergenzprozesses eingeführt. Man erhielt somit den erweiterten Konvergenzansatz

$$K = K_{\text{ref}} \cdot f_{\text{loc}} \cdot f_p \cdot f_\phi \cdot f_t \cdot f_T \quad (3.2)$$

der nachfolgend dargestellt wird.

In Gleichung (3.2) ist die Referenzkonvergenzrate K_{ref} die stationäre Konvergenzrate, die sich bei einem unversetzten Hohlraum an einem Referenzort im Laufe der Zeit einstellen würde, wenn ein konstanter Innendruck p_{ref} (Referenzdruck) und eine konstante Gebirgstemperatur T_{ref} (Referenztemperatur) herrschte. Wird ein Referenzdruck von 1 bar angenommen, so ist K_{ref} die Konvergenzrate, die in einem unverfüllten, bewetterten Grubenhohlraum gemessen werden kann.

Die Funktion f_{loc} ist eine zeitlich konstante, ortsabhängige Größe, die die Ortsabhängigkeit der stationären Konvergenzrate bei Referenzbedingungen berücksichtigt. Diese Ortsabhängigkeit wird insbesondere durch die Teufenabhängigkeit der Gebirgsspannungen verursacht. Sie kann aber auch der Hohlraumgeometrie oder lokalen Materialunterschieden in Wirtsgestein oder Versatz geschuldet sein. $K_{\text{ref}} \cdot f_{\text{loc}}(x)$ beschreibt demnach die stationäre Konvergenzrate, die sich am jeweiligen Ort x unter Referenzbedingungen einstellen würde.

Dabei sollte nicht übersehen werden, dass implizite Ortsabhängigkeiten auch in anderen Funktionen (Details s. u.) enthalten sind. So sind

- $f_p = f_p(p(x, t), p_G(x), p_{\text{ref}}, m)$,
- $f_\phi = f_\phi(\phi(x, t), \phi_r(x), m, h_i, g_i)$,
- $f_t = f_t(t, t_a(x), x)$ und
- $f_T = f_T(T(x, t), T_{\text{ref}}, Q_i, a)$.

Die Ortabhängigkeiten in diesen Funktionen betreffen jedoch, per definitionem, nicht die stationäre Konvergenzrate unter Referenzbedingungen.⁴

Die Druckabhängigkeit der Konvergenzrate wird in /NOS 05/ mit der Funktion f_p beschrieben, wobei davon ausgegangen wird, dass die Gebirgsspannungen isotrop sind:

$$f_p(p) = \left(1 - \frac{p-p_{\text{ref}}}{p_G}\right)^m \text{ für } p \leq p_G, \text{ ansonsten } f_p = 0. \quad (3.3)$$

Hierbei ist p der lokale Porendruck, p_{ref} der Referenz(poren)druck, unter dem K_{ref} ermittelt wurde, und p_G die isotrope Gebirgsspannung, die am Referenzort geherrscht hätte, wenn kein Hohlraum aufgeföhren worden wäre. Änderte man Gleichung (3.3) leicht um in

$$f_p(p) = \left(1 - \frac{p-p_{\text{ref}}}{p_G-p_{\text{ref}}}\right)^m \text{ für } p \leq p_G, \text{ ansonsten } f_p = 0, \quad (3.4)$$

so würde die Funktion f_p und damit die Konvergenzrate Null, wenn $p = p_G$ vorliegt.

Größere Veränderungen des Ansatzes von Stelte erfolgten bei der Funktion f_ϕ , die den Einfluss des Kompaktionsgrades wiedergibt und die Stützwirkung des Versatzes charakterisiert. f_ϕ wird in /NOS 05/ durch

$$f_\phi(\phi, \phi_r) = \left[1 + \frac{h(\phi, \phi_r)}{(\phi \cdot g(\phi, \phi_r))^{1/m}}\right]^{-m} \text{ für } \phi < \phi_r, \text{ ansonsten } f_\phi = 1,$$

definiert. Dabei ist ϕ_r die Referenzporosität, die unterschritten werden muss, damit die Stützwirkung des Versatzes einsetzt. Die Funktion $g(\phi, \phi_r)$ entspricht der Steltischen Geometriefunktion $g(n, n_0)$, während die Funktion $h(\phi, \phi_r)$ mit der Flächenporosität von Stelte gemäß $h(\phi, \phi_r) = 1 - \hat{n}(n, n_0)$ zusammenhängt. Im erweiterten Konvergenzansatz werden die Funktionen g und h allerdings nicht mehr auf der Grundlage

⁴ Die Referenzbedingungen beinhalten Vorgaben für $p(= p_{\text{ref}})$, $T(= T_{\text{ref}})$ und $\phi(= \phi_r(x))$, nicht aber für p_G . Ortsabhängigkeiten von $p_G(x)$ wie z. B. der normale Teufengradient müssen daher in $f_{\text{loc}}(x)$ berücksichtigt werden. Die Referenzgrößen p_{ref} und T_{ref} können wahlweise entweder einheitlich für das gesamte Modellgebiet oder orts-/teufenabhängig $p_{\text{ref}} = p_{\text{ref}}(x)$ und $T_{\text{ref}} = T_{\text{ref}}(x)$ vorgegeben werden. Im letzteren Fall müssten die durch die teufenabhängigen Temperaturen verursachten Konvergenzratenunterschiede ebenfalls in $f_{\text{loc}}(x)$ berücksichtigt werden.

eines idealisierten Kornmodelles gewonnen, sondern als erste Glieder einer Taylorreihenentwicklung an der Stelle $\phi = 0$ aufgefasst:

$$h(\phi, \phi_r) = h_0 + h_1 \frac{\phi}{\phi_r} + h_2 \left(\frac{\phi}{\phi_r}\right)^2 + h_3 \left(\frac{\phi}{\phi_r}\right)^3$$

$$g(\phi, \phi_r) = g_0 + g_1 \frac{\phi}{\phi_r} + g_2 \left(\frac{\phi}{\phi_r}\right)^2$$

Durch diese Formulierung erhält man eine größere Flexibilität zur Kalibrierung des Konvergenzansatzes. In /NOS 05/ wird ausgeführt, dass die Randbedingungen

$$h_0 = 1$$

$$h_2 = -(3 + 2h_1)$$

$$h_3 = h_1 + 2$$

$$g_0 = 1$$

anzuwenden sind. Mit $h_1 = -2$, $g_1 = -1$ und $g_2 = 0$ erhält man den betreffenden Ausdruck von Stelle für die Funktion f_ϕ , wie er in /BRÜ 85/ beschrieben wurde. (In /STE 85/ wurde der Term f_ϕ fehlerhaft notiert).

Der durch /NOS 05/ erweiterte Stelte-Ansatz beinhaltet auch eine Erweiterung der Funktion f_T , so dass nun nicht mehr auf das BGRa-Stoffmodell, sondern auf das differenziertere BGRb-Stoffmodell zurückgegriffen wird:

$$f_T(T) = \frac{1}{1+a} \cdot \exp\left(\frac{Q_1}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_G} - \frac{1}{T}\right)\right) \cdot \left[1 + a \cdot \exp\left(\frac{Q_2 - Q_1}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_G} - \frac{1}{T}\right)\right)\right]$$

Hiermit werden zwei Kriechprozesse mit unterschiedlichen Aktivierungsenergien Q_1 und Q_2 eingeführt, die über einen Faktor a gewichtet werden können.

Nach der Auffahrung eines Hohlraumes nähert sich dessen Konvergenzrate unter Referenzbedingungen mit der Zeit der stationären Referenzkonvergenzrate an. Diese Zeitabhängigkeit wird nach /NOS 05/ nun über einen neu eingeführten Faktor f_t er-

fasst. Die Konvergenzrate K_0 zum Zeitpunkt $t = 0$ (Beginn der Modellrechnungen) wird „initiale Konvergenzrate“ genannt, die Größen V_0 , ϕ_0 , T_0 , und p_0 beziehen sich ebenfalls auf diesen Zeitpunkt. Die Auffahrung des Hohlraums fand zu einem Zeitpunkt $t_a \leq 0$ statt. Der Übergang der Konvergenzrate vom initialen zum stationären Wert wird durch die Funktion f_t beschrieben. Er wird über den Ansatz

$$f_t(t) = 1 + \frac{A}{\int_{t_a}^0 K(t')dt' + \int_0^t K(t')dt'} \quad (3.5)$$

bestimmt, wobei zum Zeitpunkt $t = 0$ die Beziehung

$$f_t = \frac{K_0}{K_{\text{ref}} \cdot f_{\text{loc}} \cdot f_p(p_0) \cdot f_\phi(\phi_0) \cdot f_T(T_0)}$$

gelten muss. Aus der Definition der Konvergenzrate (1.1) folgt

$$\int_0^t K(t')dt' = \ln\left(\frac{V_0}{V(t)}\right)$$

und mit $\lambda_s := \int_{t_a}^0 K(t')dt'$ erhält Gleichung (3.5) die Form

$$f_t(t) = 1 + \frac{A}{\lambda_s + \ln(V_0/V(t))}.$$

Aus der oben genannten Anfangsbedingung lässt sich noch

$$A = \lambda_s \cdot \left(\frac{K_0}{K_{\text{ref}} \cdot f_{\text{loc}} \cdot f_p(p_0) \cdot f_\phi(\phi_0) \cdot f_T(T_0)} - 1 \right) \quad (3.6)$$

ableiten. K_0 kann experimentell vor Ort bestimmt werden. Die stationäre Konvergenzrate unter Referenzbedingungen $K_{\text{ref}} \cdot f_{\text{loc}}$ kann u. U. aus Konvergenzmessreihen extrapoliert werden. Der Parameter λ_s , der von der gesamten Vorgeschichte des aufgefahrenen Hohlraums abhängt (insbesondere von der seit der Auffahrung verstrichenen Zeit), muss in gebirgsmechanischen Rechnungen ermittelt werden.

4 Probleme der Konvergenzansätze nach Stelte

Aufgrund seiner Nähe zum Ansatz von Stelte, teilt der erweiterte Stelte-Ansatz /NOS 05/ einige der Probleme, die in Kapitel 1 beschrieben wurden. Dabei fallen insbesondere folgende Punkte auf:

- **Verwendung repräsentativer Temperaturen**

Der ursprüngliche Konvergenzansatz von Stelte wurde für homogene Temperaturen hergeleitet, wodurch der Einfluss inhomogener Temperaturfelder konzeptuell nicht mehr konsistent beschrieben werden kann. Zumindest wird von den im Ansatz verwendeten „mittleren“ Temperaturen implizit angenommen, dass sie sowohl für die Skala der Poren als auch für die Skala des Grubenhohlraums repräsentativ sind, was selten der Fall sein dürfte. Der erweiterte Stelte-Ansatz beinhaltet diese Zusammenhänge im Grunde immer noch, auch wenn er sich stärker davon gelöst hat, das Konvergenzverhalten der Pore aus Betrachtungen für den Grubenhohlraum abzuleiten.

Trotz der konzeptionellen Inkonsistenz, die sich ergibt, wenn man die Konvergenzansätze nach Stelte auf inhomogene Temperaturfelder anwendet, kann die verwendete funktionale Temperaturabhängigkeit durchaus eine sinnvolle Anpassungsfunktion ergeben. In diesem Falle stellt sich allerdings die Frage nach der Wahl der „mittleren“ bzw. repräsentativen Temperaturen. Hirsekorn & Tix /HIR 96/ stellten für inhomogene, stationäre Temperaturfelder Überlegungen zum Ort an, an dem die repräsentative Temperatur gemessen werden kann. Ihre Ergebnisse können jedoch nicht direkt auf instationäre Temperaturfelder, wie sie gerade in der ersten Zeit nach Einlagerung wärmeentwickelnder Abfälle auftreten, übertragen werden.

- **Abgeleitetes Versatzverhalten**

Im Stelte-Ansatz wird das Versatzverhalten aus dem Gebirgsverhalten abgeleitet, obwohl in der Praxis eine gewisse Unabhängigkeit der Materialgesetze von Gebirge und Versatz vorhanden sein dürfte. Beispielsweise ist es denkbar, dass das Material des Salzgruses nicht dem Steinsalz des Gebirges entspricht.

Die Herleitung des Versatzverhaltens aus den Eigenschaften des Gebirges ist auch insofern problematisch, als dass Steinsalz eine skalenabhängige Struktur und Textur besitzen kann, so dass die zur Ableitung des Versatzverhaltens genutzte Ska-

lenunabhängigkeit der stationären Konvergenzrate womöglich gar nicht gegeben ist.

Mit dem erweiterten Stelte-Ansatz ist es mit Hilfe der flexibleren Geometriefunktion möglich, ein individuelles Versatzverhalten zu beschreiben. Allerdings ist es auch in diesem Ansatz nicht möglich, experimentell bestätigte Stoffgesetze für die Kompaktion des Salzgrusversatzes direkt zur Parametrisierung des Konvergenzansatzes zu verwenden.

- **Homogenitäts- und Isotropieannahmen**

Die Ableitung des Konvergenzansatzes nach Stelte beruht auf verschiedenen Homogenitätsannahmen in Bezug auf Temperatur, Spannung und Porosität. Zudem werden einige Spannungen als isotrop angenommen. Dies stellt eine Vereinfachung der realen Verhältnisse dar, so dass sich die Frage stellt, wie gut die mit dem Konvergenzansatz beschriebenen physikalischen Vorgänge und Zustände die tatsächlichen widerspiegeln.

Eine inhomogene Kompaktion des Versatzes konnte beispielsweise im Rahmen eines Langzeitkompaktionsversuches im TSDE-Projekt festgestellt werden /DRO 01/. Als Ursache der inhomogenen Porositätsverteilung wurde dort die Inhomogenität der Versatztemperatur identifiziert, die in Abhängigkeit vom Abstand zu den Wärmequellen variierte. Eine variable Porosität bedeutet, dass die im Konvergenzansatz verwendete repräsentative Porosität nicht zur Bestimmung der Permeabilität des Salzgruses verwendet werden kann.

Solange der Stützdruck des Versatzes noch gering ist, dürfte auflastbedingt auch eine von oben nach unten zunehmende Versatzkompaktion auftreten. Dieser Effekt sollte zwar wenig Einfluss auf die Konvergenzrate haben, die zu diesem Zeitpunkt durch das Gebirge bestimmt wird, er kann aber für die effektive Permeabilität des Versatzes – insbesondere bei der Existenz eines Firstspaltes – eine Rolle spielen.

In konzeptueller Hinsicht stellt sich die Frage, wie ein Modell physikalisch zu verstehen ist, wenn die getroffenen Homogenitäts- und Isotropieannahmen nicht erfüllt sind. Im Extremfall würde ein solches Modell zu einem rein deskriptiven Modell des Konvergenzfortschritts. Dies stellt die Praxistauglichkeit des Modells aber nicht grundsätzlich in Frage.

- **Keine funktionale Berücksichtigung der Feuchte**

Die Konvergenzansätze nach Stelte beschreiben die Feuchteabhängigkeit der Konvergenzrate nicht funktional, können diese aber über feuchtespezifische Parametersätze erfassen. Wegen der fehlenden funktionalen Erfassung können sie den Einfluss einer sich zeitlich ändernden Feuchte, wie sie zum Beispiel durch den Transport von Wasserdampf im Endlager erzeugt werden könnte, nicht gut berücksichtigen. Konzeptuell könnte eine Berücksichtigung der Feuchte am besten durch eine Erweiterung der Geometriefunktion realisiert werden, da diese wie auch der Feuchteinfluss die Stützwirkung des Versatzes betrifft.

- **Produktansatz**

Die im erweiterten Stelte-Ansatz gewählte Methode, zusätzliche Einflussfaktoren wie z. B. die Instationarität des Kriechens durch weitere Faktoren zu berücksichtigen, entspricht nicht dem originären Ansatz von Stelte, dessen Produktansatz sich (zumindest für den Fall kleiner Porositäten) aus physikalischen Überlegungen ableitete. Das Hinzufügen weiterer Faktoren zum Konvergenzansatz im Sinne eines Produktansatzes ist zwar nicht grundsätzlich abzulehnen, schwächt aber seine physikalische Rechtfertigung.

Der Produktansatz beruht auf der Annahme, dass die Wirkung einer physikalischen Einflussgröße extrahiert und unabhängig von den Wirkungen der anderen Einflussgrößen beschrieben werden kann. Es wird also zum Beispiel behauptet, dass die Zeitabhängigkeit des Kriechens immer durch den gleichen Faktor f_t erfasst werden kann, unabhängig davon, welches Temperaturfeld gerade vorliegt. In der Realität dürfte die Komplexität der physikalischen Wechselwirkungen so hoch sein, dass die postulierte Unabhängigkeit der Einflüsse wahrscheinlich nur eine grobe Approximation darstellt.

5 Lösungsansätze

Die oben genannten Probleme gaben Anstoß zu verschiedenen Weiterentwicklungen. Eine dieser Entwicklungen ist die Verwendung von Temperatur-Feuchte-Klassen, mit der die Unsicherheiten bei der Bestimmung des Temperatureinflusses gewürdigt werden. Eine andere Entwicklung, die im vorliegenden Vorhaben durchgeführt wurde, ist die Ableitung eines Konvergenzansatzes mit unabhängigen Materialgesetzen für Gebirge und Versatz.

5.1 Bildung von Temperatur-Feuchte-Klassen

Im Vorhaben *Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG)* des BMU /FIS 13/ wurden insbesondere die oben erwähnten Schwierigkeiten, die Temperatur- und Feuchteabhängigkeit der Konvergenzrate mit dem erweiterten Stelte-Ansatz zu beschreiben, zur Kenntnis genommen. Um diesen Unsicherheiten Rechnung zu tragen, wurde eine vereinfachte Vorgehensweise zur Bestimmung der Konvergenzraten gewählt.

Im Wesentlichen wurde im Konvergenzansatz (3.2) der Faktor f_T für den Temperatureinfluss gleich 1 gesetzt, weil davon ausgegangen wurde, dass dieser Faktor für ein sich zeitlich und räumlich veränderndes Temperaturfeld nicht ausreichend genau bestimmbar sei. Damit ergibt sich als vereinfachter Konvergenzansatz

$$K = K_{\text{ref}} \cdot f_{\text{loc}} \cdot f_p \cdot f_\phi \cdot f_t \quad (5.1)$$

Um die Wirkung der Temperatur und der Feuchte zu erfassen, wurden in Anbetracht der im Endlager variierenden Versatzfeuchte und Temperaturentwicklung die Temperaturklassen „heiß“, „warm“ und „kalt“ sowie die Feuchtklassen „trocken“ (für einen Feuchtigkeitsgehalt von ca. 0,02 Gew.-%) und „feucht“ (für einen Feuchtigkeitsgehalt von ca. 0,6 Gew.-%) definiert. Für jede Temperatur-Feuchte-Klassenkombination wurde ein Szenario entworfen, das die Feuchteverhältnisse und eine repräsentative Temperaturentwicklung beschrieb. Für jedes dieser Szenarien wurde die Porositätsentwicklung in einer salzgrusgefüllten Strecke mit Hilfe des hydromechanischen Programms Code_Bright (/COD 02, LAR 13/) berechnet (siehe Abb. 5.1). Hierbei wurde von konstanten Porendrücken (Atmosphärendruck) ausgegangen, was drainierten Bedingungen bei der Deformation entspricht. Zum Zwecke der Unsicherheitsbetrachtung wurden die Simulationen mit unterschiedlichen Annahmen für die Kriechklasse des Salzes

durchgeführt (Kriechklasse 3 für langsame Konvergenz und Kriechklasse 5 für schnelle Konvergenz).

Die Kalibrierung des vereinfachten Konvergenzansatzes (5.1) an die mit Code_Bright berechneten Konvergenzverläufe erfolgte nicht durch Anpassung des gesamten Kurvenverlaufes, sondern durch Anpassung des Zeitpunktes, an dem der Versatz die Porosität 5 % erreicht. Als Kalibrierungsparameter wurde der Parameter f_{loc} verwendet. In der Funktion f_ϕ wurde der Parameter g_2 für trockenen Salzgrus auf 100 und für feuchten Salzgrus auf 10.000 gesetzt. Die übrigen Parameterwerte des Konvergenzansatzes wurden entsprechend Tab. 5.1 gewählt. Somit erhielt man durch Kalibrierung des Parameters f_{loc} für jede Temperatur-Feuchte-Klasse (und jede Kriechklassenannahme) einen eigenen Parametersatz für den Konvergenzansatz. Die gewählten Werte für f_{loc} sind in Tab. 5.2 dargestellt.

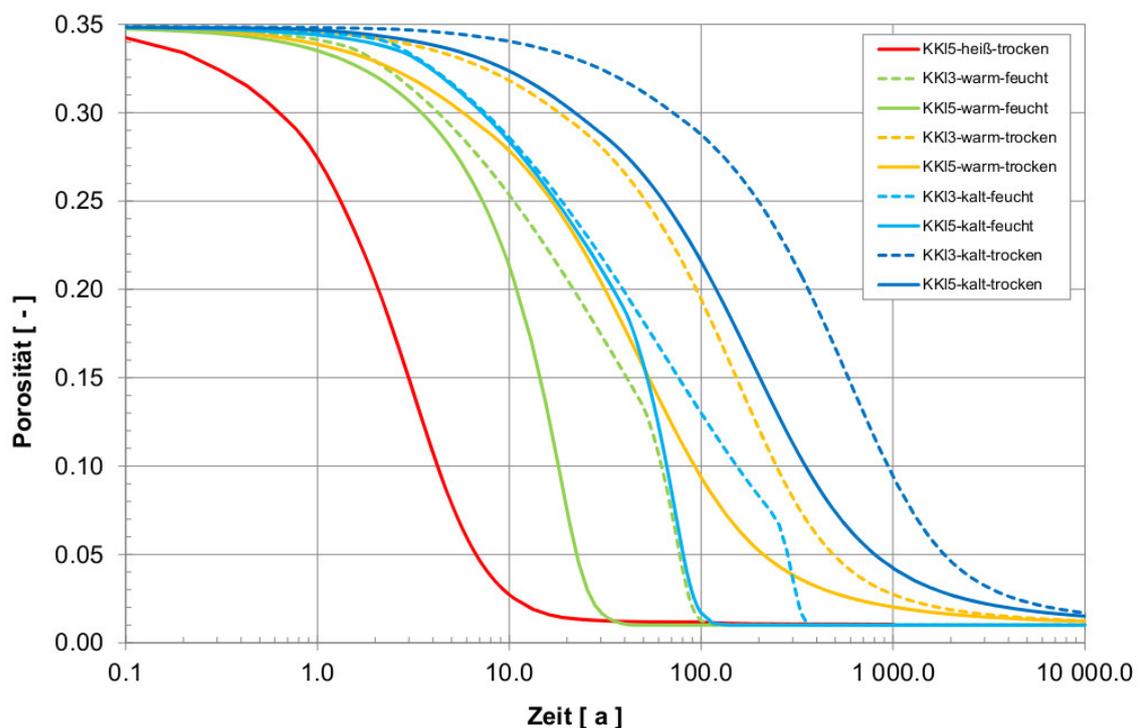


Abb. 5.1 Berechnung der Salzgruskompaktion mit Code_Bright (aus /LAR 13/)

In der Legende bezeichnet „KKI“ die jeweils betrachtete Kriechklasse für Steinsalz (Kriechklassen 3 und 5). Steinsalz mit der Kriechklasse 5 besitzt eine höhere Kriechfähigkeit als Steinsalz mit der Kriechklasse 3.

Für die anschließenden Strömungs- und Stofftransportrechnungen mit MARNIE und TOUGH2 wurde jedem Element des Modellgitters eine passende Temperatur-Feuchte-Klasse mit den zugehörigen Parameterwerten für den Konvergenzansatz zugeordnet. Eine Unsicherheitsbetrachtung erfolgte durch Änderung der Kriechklassenannahme.

Tab. 5.1 Parameter zur Kalibrierung des Konvergenzansatzes (nach /LAR 13/)

Parameter	Wert
h_0	1
h_1	-2
h_2	1
h_3	-2
g_0	1
g_1	-1
λ_s	$1 \cdot 10^{-6}$
K_{ref}	$0,01 \text{ a}^{-1}$
ϕ_0	0,3
K_0	$0,01 \text{ a}^{-1}$
m	4
p_{ref}	$1 \cdot 10^5 \text{ Pa}$

Tab. 5.2 Ergebnis der Kalibrierung des Faktors f_{loc} (nach /LAR 13/)

Zeitdauer bis zum Erreichen einer Porosität von 5 %	f_{loc} für trockenen Versatz ($g_2 = 100$)	f_{loc} für feuchten Versatz ($g_2 = 10.000$)
10 Jahre	9,5	4,8
50 Jahre	1,9	0,96
80 Jahre	1,1875	0,6
100 Jahre	0,95	0,48
200 Jahre	0,475	0,24
800 Jahre	0,11875	0,06
1000 Jahre	0,095	$4,8 \cdot 10^{-2}$

5.2 Ansatz mit unabhängigen Materialgesetzen für Gebirge und Versatz

Der Konvergenzansatz von Stelte leitet das Materialgesetz für den Versatz aus dem Materialgesetz für das Gebirge und zusätzlichen Überlegungen zum Einfluss der Versatzporosität ab. Im Gegensatz dazu verzichtet der erweiterte Stelte-Ansatz auf eine solche Herleitung indem er die Geometriefunktion als reine Anpassungsfunktion versteht. Dies gibt dem Ansatz eine gewisse Flexibilität zur Darstellung eines individuellen Versatzverhaltens. Dennoch können bestehende Materialgesetze für den Salzgrusversatz nicht direkt integriert werden. Im Folgenden wird daher ein Konvergenzansatz abgeleitet, der unabhängige Materialgesetze für Gebirge und Versatz verwendet. Als Materialgesetz für den Salzgrus wird hierzu das Stoffgesetz von Zhang /ZHA 93/ verwendet.

Nach Zhang kann die Kompaktionsrate ε_V eines Salzgrusversatzes mit Porosität ϕ durch das Gesetz

$$\varepsilon_V = A_V e^{-\frac{Q_V}{RT_V}} \left(\frac{\bar{\sigma}}{\sigma_{\text{ref}}} \right)^{n_V} \left[\ln \frac{\phi_0(1-\phi)}{\phi(1-\phi_0)} \right]^{-m} \quad (5.2)$$

beschrieben werden. In dieser Gleichung entspricht die „Kompaktion“

$$\varepsilon_V := -\frac{V - V_0}{V_0},$$

die für den Kompaktionsbereich $V \leq V_0$ definiert wird, der üblichen volumetrischen Dehnung mit entgegengesetztem Vorzeichen. Der Index „0“ bezeichnet in Gleichung (5.2) den jeweiligen Zustand zu Beginn des Kompaktionsprozesses, der Index „V“ steht für „Versatz“. Ferner sind A , Q , n und m positive (nicht notwendigerweise ganzzahlige) Materialparameter, T_V ist die (homogene) Versatztemperatur und R die universelle Gaskonstante. $\bar{\sigma}$ ist die mittlere Spannung des Versatzes – hier für Kompression positiv definiert – und $\sigma_{\text{ref}} > 0$ eine Referenzspannung. Es wird von einer Homogenität der Versatztemperatur und der Spannungen sowie von einer Spannungsisotropie ausgegangen.

Das Zhang-Modell beschreibt das Versatzverhalten bei Fehlen eines signifikanten Porendrucks, also unter drainierten Bedingungen. Ein Merkmal des Zhang-Modells ist,

dass es für die Porositäten $\phi = 0$ und $\phi = \phi_0$ nicht definiert ist. Für $\phi \rightarrow 0$ geht der letzte Faktor in Gleichung (5.2) gegen Null, für $\phi \rightarrow \phi_0$ gegen Unendlich.

Formt man Gleichung (5.2) nach der mittleren Spannung im Versatz $\bar{\sigma}$ um, so erhält man

$$\bar{\sigma} = \sigma_{\text{ref}} \left(\frac{\dot{\varepsilon}_V}{A_V e^{-\frac{Q_V}{RT_V}}} \right)^{\frac{1}{n_V}} \left[\ln \frac{\phi_0(1-\phi)}{\phi(1-\phi_0)} \right]^{\frac{m}{n_V}} \quad (5.3)$$

Bezüglich dieser mittleren Spannung wird hier nun angenommen, dass sie sich aus der Normalspannung auf der Hohlraumkontur $\sigma_{\text{interface}}$ (welche der Kontur des Versatzkörpers entspricht) und dem Porendruck p durch

$$\bar{\sigma} = \sigma_{\text{interface}} - \alpha p \quad (5.4)$$

berechnen lässt. Hierbei ist $0 \leq \alpha \leq 1$ ein Effektivspannungskoeffizient.

Für die Konvergenzrate des Gebirges $\dot{\varepsilon}_G$ wird ähnlich zum erweiterten Stelte-Ansatz das BGRb-Modell angewandt:

$$\dot{\varepsilon}_G = \left(A_1 e^{-\frac{Q_1}{RT_G}} + A_2 e^{-\frac{Q_2}{RT_G}} \right) \left(\frac{\bar{\sigma}_G}{\sigma_{\text{ref}}} \right)^{n_G} \quad (5.5)$$

Dabei wird angenommen, dass die Spannung $\bar{\sigma}_G$, die den Konvergenzprozess antreibt, die Differenz zwischen dem (isotropen) lithostatischen Druck σ_{lith} und der Normalspannung auf der Hohlraumkontur $\sigma_{\text{interface}}$ ist:

$$\bar{\sigma}_G = \sigma_{\text{lith}} - \sigma_{\text{interface}} \quad (5.6)$$

Soll wie in den Konvergenzansätzen nach Stelte zur Kalibration eine Referenzkonvergenzrate $K_{\text{ref}} = \dot{\varepsilon}_G(T_{\text{ref}}, p_{\text{ref}})$ vorgegeben werden, so lässt sich der Parameter A_1 in Gleichung (5.5) durch

$$A_1 = K_{\text{ref}} \left(\frac{\sigma_{\text{lith}} - p_{\text{ref}}}{\sigma_{\text{ref}}} \right)^{-n_G} e^{\frac{Q_1}{RT_{\text{ref}}}} \quad (5.7)$$

bestimmen, sofern man voraussetzt, dass $A_2 = 0$ ist.

Um nun die Spannung in Gebirge, im Versatz und im Porenraum miteinander in Beziehung zu setzen, wird in Gleichung (5.6) die Spannung $\sigma_{\text{interface}}$ mit Hilfe von Gleichung (5.4) substituiert, so dass man als Beziehung für die mechanische Kopplung von Versatz und Gebirge

$$\bar{\sigma}_G = \sigma_{\text{lith}} - \bar{\sigma} - \alpha p \quad (5.8)$$

erhält.

Gleichung (5.5) wird, wenn man zunächst die Beziehung (5.8) und dann die Beziehung (5.3) nutzt, zu

$$\varepsilon_G = \left(A_1 e^{-\frac{Q_1}{RT_G}} + A_2 e^{-\frac{Q_2}{RT_G}} \right) \cdot \left(\frac{\sigma_{\text{lith}} - \alpha p}{\sigma_{\text{ref}}} - \left(\frac{\varepsilon_V}{A_V e^{-\frac{Q_V}{RT_V}}} \right)^{\frac{1}{n_V}} \left[\ln \frac{\phi_0(1-\phi)}{\phi(1-\phi_0)} \right]^{\frac{m}{n_V}} \right)^{n_G} \quad (5.9)$$

Da davon ausgegangen wird, dass Versatzkörperkontur und Hohlraumkontur identisch sind (Gebirgshohlraum vollständig verfüllt), gilt $\varepsilon := \varepsilon_G = \varepsilon_V$. Hiermit ergibt sich mit Gleichung (5.9) der Konvergenzansatz

$$\frac{\sigma_{\text{lith}} - \alpha p}{\sigma_{\text{ref}}} - \left(\frac{\varepsilon}{A_V e^{-\frac{Q_V}{RT_V}}} \right)^{\frac{1}{n_V}} \left(\ln \frac{\phi_0(1-\phi)}{\phi(1-\phi_0)} \right)^{\frac{m}{n_V}} - \left(\frac{\varepsilon}{A_1 e^{-\frac{Q_1}{RT_G}} + A_2 e^{-\frac{Q_2}{RT_G}}} \right)^{\frac{1}{n_G}} = 0 \quad (5.10)$$

Dieser stellt eine implizite Gleichung zur Bestimmung der Konvergenzrate ε dar. In Gleichung (5.10) verschwindet der Term

$$\left(\ln \frac{\phi_0(1-\phi)}{\phi(1-\phi_0)} \right)^{\frac{m}{n_V}}$$

unter der Bedingung $\phi = \phi_0$ und geht gegen Unendlich, wenn ϕ gegen 0 strebt.

Ist die Porosität nahe der Anfangsporosität, so wird Gleichung (5.10) durch den Term

$$\left(\frac{\dot{\varepsilon}}{A_1 e^{-\frac{Q_1}{RT_G}} + A_2 e^{-\frac{Q_2}{RT_G}}} \right)^{\frac{1}{n_G}}$$

bestimmt, der also das Gebirgsverhalten beschreibt. Bei sehr kleiner Porosität dagegen wird der Term

$$\left(\frac{\dot{\varepsilon}}{A_V e^{-\frac{Q_V}{RT_V}}} \right)^{\frac{1}{n_V}}$$

dominant, der also entsprechend das Versatzverhalten erfasst. Ist $\sigma_{\text{lith}} = \alpha p$, so wird $\dot{\varepsilon} = 0$, und die Konvergenz kommt zum Erliegen.

Gleichung (5.10) kann für $n_V \neq n_G$ nicht in eine explizite Form überführt werden. Zur numerischen Lösung des Konvergenzansatzes muss also ein Verfahren zur Nullstellenbestimmung eingesetzt werden. Für sehr kleine und sehr große Porositäten ist es sinnvoll, dem Umstand auszunutzen, dass unter Verwendung einer beliebigen Zahl $\beta > 0$ die Beziehung

$$\dot{\varepsilon}^{\frac{1}{n}} = \dot{\varepsilon}^{\frac{1}{\beta}} \cdot \dot{\varepsilon}^{\frac{1}{n} - \frac{1}{\beta}}$$

gilt. Hiermit lässt sich Gleichung (5.10) in die Form

$$\dot{\varepsilon} = \left(\frac{\sigma_{\text{lith}} - \alpha p}{\sigma_{\text{ref}}} \right)^{\beta} \left[X \dot{\varepsilon}^{\frac{1}{n_V} - \frac{1}{\beta}} + Y \dot{\varepsilon}^{\frac{1}{n_G} - \frac{1}{\beta}} \right]^{-\beta} \quad (5.11)$$

bringen mit

$$X := \left(A_V e^{-\frac{Q_V}{RT_V}} \right)^{-\frac{1}{n_V}} \cdot \left(\ln \frac{\phi_0(1-\phi)}{\phi(1-\phi_0)} \right)^{\frac{m}{n_V}} \quad (5.12)$$

und

$$Y := \left(A_1 e^{-\frac{Q_1}{RT_G}} + A_2 e^{-\frac{Q_2}{RT_G}} \right)^{-\frac{1}{n_G}} \quad (5.13)$$

Ausgehend von einer ersten Schätzung kann ε durch iterative Anwendung der Gleichung (5.11) approximiert werden. Um den Iterationsprozess zu beschleunigen, wird der Parameter β so gewählt, dass der Fehler bei der Schätzung von ε möglichst wenig ins Gewicht fällt. In Gleichung (5.11) wird der Term X bei kleinen Porositäten groß gegenüber Y . In diesem Fall setzt man $\beta := n_V$, so dass

$$\frac{1}{\varepsilon^{n_V}} - \frac{1}{\beta} = 1$$

ist. Entsprechend setzt man für sehr geringe Kompaktionsgrade $\beta := n_G$. Die Konvergenzrate kann auf diese Weise, ausgehend von einer ersten Schätzung der Konvergenzrate und durch geeignete Wahl von β , iterativ bestimmt werden.

Man erkennt übrigens, dass der durch Gleichung (5.11) ausgedrückte Konvergenzansatz in Bezug auf die Druckabhängigkeit zwar noch einem Produktansatz gleicht, nicht mehr aber in Bezug auf die Einflüsse der Temperatur und Porosität.

Zur Illustration der Funktionsweise des Konvergenzansatzes wurde die konvergenzbedingte Porositätsentwicklung eines mit Salzgrus gefüllten Hohlraumes im Steinsalz einmal mit dem Stelle-Ansatz und einmal mit dem neuen Konvergenzansatz ermittelt. Die Berechnung der Konvergenzrate nach Stelle erfolgte dabei mit Hilfe des erweiterten Stelle-Ansatzes mit den Parametern $h_1 = -2$, $g_1 = -1$ und $g_2 = 0$, wodurch das Versatzverhalten des ursprünglichen Stelle-Ansatzes abgebildet wird.

Die Konvergenz des verfüllten Hohlraumes verläuft unter drainierten Bedingungen, so dass im Porenraum ein konstanter Druck von 1 bar bestehen bleibt. Das Konvergenzverhalten des Gebirges wird über einen lithostatischen Druck von 18.8 MPa, eine Temperatur von 311 K und eine Referenzkonvergenzrate von $K_{\text{ref}} = 0.01 \text{ a}^{-1}$ gesteuert. Für den Spannungsexponenten wird $n_G = 4$ gewählt. Diese Werte wurden /RÜB 10/ entnommen und beziehen sich auf eine Endlagertiefe von 870 m.

Für die Aktivierungsenergie Q_1 wurde der gleiche Wert wie für den Versatz verwendet (siehe unten). Sie wird daher aus $Q_1/R = Q_V/R = 6520 \text{ K}^{-1}$ bestimmt. Darüber hinaus werden die Referenzwerte $p_{\text{ref}} = 1 \text{ bar}$ und $\sigma_{\text{ref}} = 1 \text{ MPa}$ gewählt. Mit der Annahme $A_2 = 0$ sind nun die Parameter des Stoffgesetzes für das Gebirge im neuen Konvergenzansatz eindeutig bestimmt.

Für den Versatz wird eine Anfangsporosität von 44 % angesetzt. Beim Stelste-Ansatz ergibt sich das Versatzverhalten wegen der dort zugrunde gelegten Analogie zwischen der Grubenraum- und der Porenkonvergenz indirekt aus der Referenzkonvergenzrate. Für das Stoffgesetz von Zhang wurden Parameterwerte für trockenen und für feuchten Salzgrus ausgewählt, die von /SAL 07/ in Langzeit-Kompaktionstests ermittelt wurden. Dabei wird für den Effektivspannungskoeffizienten $\alpha = \phi$ angenommen.

In den von /SAL 07/ durchgeführten Langzeit-Kompaktionstests besaßen die trockenen Proben Wassergehalte zwischen 0.06 und 0.07 Gew.-%, die feuchten Proben Wassergehalte zwischen 0.42 und 0.65 Gew.-%. Dabei wurden erhebliche Unterschiede im mechanischen Verhalten festgestellt. Während für die trockenen Proben für einen Druck von 20 MPa eine Zeit von 8 bis 9 Jahren für die Kompaktion von 9 ± 1 % auf 6 % Porosität errechnet wurde, erreichten die feuchten Proben diesen Wert unter gleichen Bedingungen bereits nach 9 Tagen. Für die feuchten Proben wurde von /SAL 07/ das Zhang-Modell mit den Werten $A_V = 300000 \text{ min}^{-1}$, $Q_V/R = 6520 \text{ K}^{-1}$, $\sigma_{\text{ref}} = 1 \text{ MPa}$, $m = 8$ und $n_V = 1$ angepasst, für die trockenen Proben mit $A_V = 3000 \text{ min}^{-1}$, $Q_V/R = 6520 \text{ K}^{-1}$, $\sigma_{\text{ref}} = 1 \text{ MPa}$, $m = 8$ und $n_V = 1$. Die Konvergenzrechnungen mit dem Zhang-Modell verwenden eine Temperatur $T_V = 311 \text{ K}$ entsprechend der Temperatur im Gebirge.

In Abb. 5.2 ist die Entwicklung der Konvergenzrate dargestellt, in Abb. 5.3 die der Porosität. Alle Rechnungen enden mit dem Erreichen einer Porosität von 1 %. In Abb. 5.2 deutlich zu erkennen sind die geringeren Konvergenzraten, wenn das idealisierte Versatzmodell von Stelste zu Anwendung kommt, was sich in einer langsameren Porositätsabnahme ausdrückt. Dies steht im Einklang mit der Einschätzung von Stelste, dass die von ihm hergeleitete Form der Geometriefunktion die tatsächliche Geometriefunktion unterschätzt und somit geringere Konvergenzraten erzeugt.

In Abb. 5.3 ist weiterhin zu beobachten, dass der Einfluss der Versatzfeuchte und damit der grundsätzliche Versatzeinfluss sich beim neuen Konvergenzansatz mit den gewählten Parameterwerten erst bei Porositäten unterhalb 5 bis 10 % bemerkbar macht. Bei größeren Porositäten wird der Konvergenzvorgang offenbar durch das Gebirgsverhalten geprägt. Beim Konvergenzansatz von Stelste paust sich das Versatzverhalten bereits bei sehr viel höheren Porositäten durch. Der Stelste-Ansatz überschätzt also die Stützwirkung des Versatzes bei geringen Kompaktionsgraden.

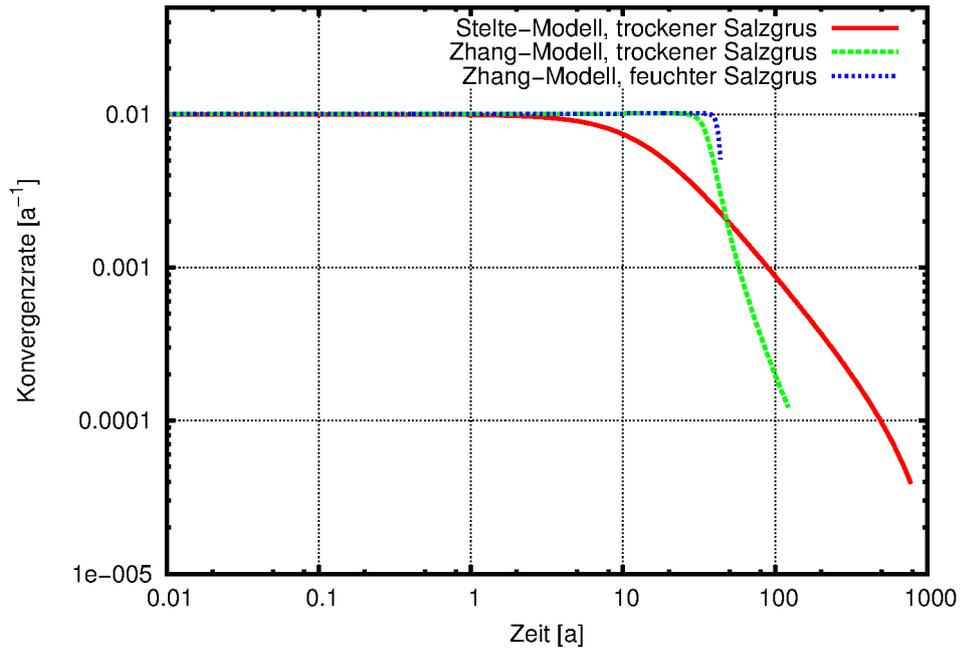


Abb. 5.2 Entwicklung der Konvergenzrate für verschiedene Versatzmodelle und Feuchtegrade (Alle Simulationen enden bei einer Porosität von 1 %)

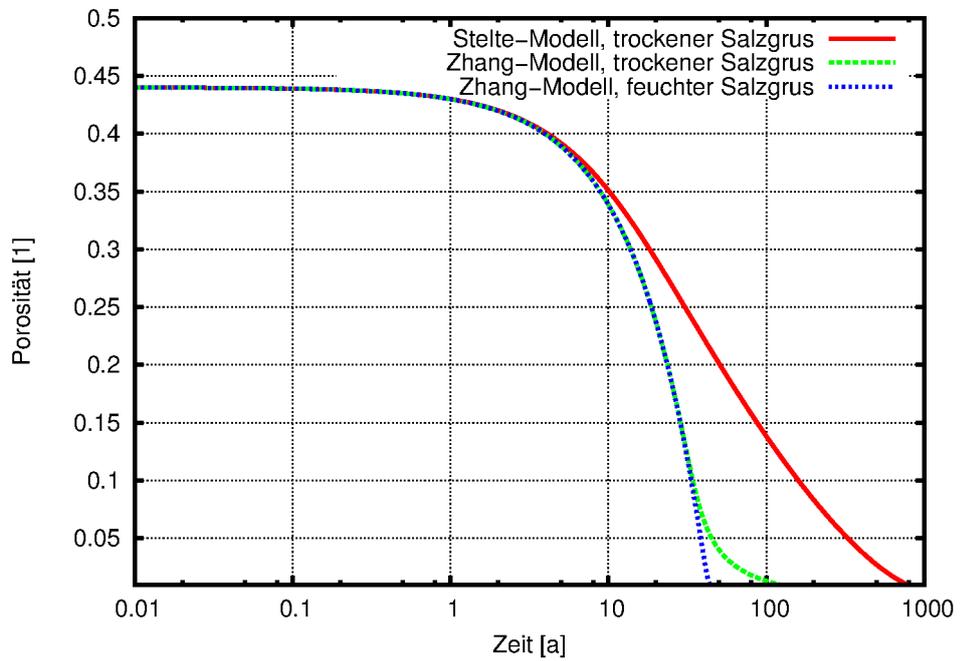


Abb. 5.3 Porositätsentwicklung für verschiedene Versatzmodelle und Feuchtegrade

6 Diskussion

In den folgenden Punkten werden einzelne Merkmale der vorgestellten Konvergenzansätze im Kontext der Endlagerentwicklung und des Langzeitsicherheitsnachweises betrachtet. Dabei wird auf folgende Ansätze Bezug genommen:

- Stelste-Ansatz (Kapitel 2) und erweiterter Stelste-Ansatz (Kapitel 3), beide zusammen nachfolgend auch „Ansätze nach Stelste“ genannt.
- Ansatz mit unabhängigen Materialgesetzen für Gebirge und Versatz, nachfolgend „alternativer Konvergenzansatz“ genannt (Abschnitt 5.2).

Temperatureinfluss

Der Einfluss des Temperaturfeldes auf die Konvergenzrate wird in den Konvergenzansätzen nach Stelste und dem hier vorgestellten, alternativen Konvergenzansatz nur sehr grob erfasst. Dies führt zu Unsicherheiten bei der Anwendung der Ansätze auf inhomogen-instationäre Temperaturfelder. Die Abweichung von der in allen vorgestellten Ansätzen getroffenen Annahme einer homogenen Temperatur ist besonders in der ersten Phase nach Verschluss eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle hoch. Für diese Phase wäre ein differenzierteres physikalisches Modell zur Erfassung der Temperatureinflüsse wünschenswert, vor allem in Anbetracht der hohen Sensitivität der Kriechraten gegenüber Temperaturänderungen.

In der Anfangsphase nimmt der Konvergenzprozess vor allem Einfluss auf den Aufbau des Porendrucks, da die Konvergenzraten wegen der geringen Stützwirkung des Versatzes und der erhöhten Temperaturen hoch sind. Die Unsicherheiten bei der Erfassung des Temperatureinflusses implizieren also Unsicherheit bezüglich der Geschwindigkeit des Druckaufbaus der eingeschlossenen Gase und der Stärke und Richtung der Gasflüsse. Dies kann z. B. in Hinblick auf den frühen Transport kontaminierter Gase innerhalb des Endlagers relevant sein. Die Geschwindigkeit und Höhe des Gasdruckaufbaus können aber auch wichtig sein, um ein eventuelles Eindringen von Lauge in das Endlager zu verhindern oder zu verzögern.

Versatzverhalten

Solange der Versatz keine nennenswerte Stützwirkung entfaltet, bestimmen die Materialeigenschaften des Gebirges die Konvergenzraten. Erst danach werden die Materi-

aleigenschaften des Versatzes relevant, die dann gemeinsam mit dem Porendruck die Dauer des Kompaktionsvorgangs kontrollieren. Die Unsicherheiten bezüglich des Versatzverhaltens implizieren also Unsicherheiten hinsichtlich der Zeitdauer, die benötigt wird, bis der Versatz die Eigenschaften eines hydraulischen Verschlusses annimmt.

Die Unsicherheiten bei der Beschreibung des Versatzverhaltens sind teilweise modelltechnischer Art. Der ursprüngliche Stelte-Ansatz verwendet ein stark vereinfachtes, theoretisch abgeleitetes Materialgesetz für den Versatz, das sich an der Referenzkonvergenzrate des Gebirges orientiert und die Stützwirkung des Versatzes in vielen Fällen überschätzen dürfte (siehe Abb. 5.2 und Abb. 5.3). Der erweiterte Stelte-Ansatz besitzt demgegenüber eine größere Flexibilität zur Beschreibung eines individuellen Versatzverhaltens. Er implementiert jedoch kein spezifisches Materialgesetz, sondern verwendet zur Beschreibung der Stützwirkung Anpassungsfunktionen, die am Verhalten des Gesamtsystems „Gebirge-Versatz-Porenfluid“ kalibriert werden müssen. In dem in diesem Bericht vorgestellten, alternativen Konvergenzansatz werden die Parameter des Zhang-Modells, welche z. B. in Laborversuchen kalibriert werden können, zur Parametrisierung des Konvergenzansatzes direkt übernommen. Allerdings steht eine praktische Prüfung dieses Konvergenzansatzes noch aus.

Die wesentlichen Unsicherheiten zum Versatzverhalten dürften weniger modelltechnischer als vielmehr experimenteller Natur sein. Das liegt daran, dass der Porositätsbereich unter 10 % unter natürlichen Bedingungen und bei realistischen Kompaktionsraten nicht mit vertretbarem Zeitaufwand untersucht werden kann. Auch ist die Übertragbarkeit experimenteller Ergebnisse, die bei hohen Verformungsraten erzielt wurden, unklar /KRÖ 09/.

Ein wichtiger Aspekt, der nur experimentell geklärt werden kann, ist die Permeabilitätsentwicklung des Salzgrusversatzes im Porositätsbereich von einigen Prozent, denn über sehr lange Zeiträume von einigen 10.000 oder 100.000 Jahren könnten auch sehr kleine Permeabilitäten – selbst wenn sie auf Anhieb vernachlässigbar gering erscheinen – eine hydraulische Wirkung entfalten /KOC 12, LAR 13/. Die Permeabilität des Versatzes ist nicht nur eine Frage der Porosität, sondern auch eine Frage der Porenvernetzung. Diese zu erfassen ist nicht Ziel des Konvergenzansatzes und benötigt daher eine zusätzliche Korrelation zwischen Porosität und Permeabilität bzw. Porenvernetzung. Aus einer solchen Korrelation ergäbe sich dann auch die Existenz einer hydromechanisch bedingten Restporosität für die Kompaktion, die dadurch entsteht, dass

das Fluid die schlecht vernetzten Poren nicht mehr verlassen kann, so dass der Porendruck ansteigt und die Porenraumreduktion zum Erliegen kommt.

Homogenität

Alle hier betrachteten Konvergenzansätze gehen von einer homogenen Porositätsverteilung im Versatz (aufgrund der homogen-isotropen Spannungsannahmen) aus. Wenn die tatsächliche Porositätsverteilung über den Streckenquerschnitt inhomogen ist, dürfte dies zu einer Unterschätzung der effektiven streckenparallelen Permeabilität führen.

Mögliche Firstspalte und auflastbedingte, vertikale Kompaktionsunterschiede dürften vor allem dann eine Rolle spielen, wenn der Druck der Versatzsäule noch groß gegenüber dem Stützdruck des Versatzes ist. In den Einlagerungsstrecken dürften inhomogene Porositätsverteilungen durch die Temperaturgradienten in der Nähe der wärmeentwickelnden Abfälle erzeugt werden /DRO 01/.

Einfluss der Feuchte

Bereits geringe Feuchtgehalte von ca. 0,4 Gew.-% können die Stützwirkung des Versatzes deutlich mindern /SAL 07/. Insofern ist es möglich, dass es in einem relativ trockenen Endlager bereits durch den Transport von Wasserdampf zu einer Veränderung der Stützwirkung des Versatzes kommen kann.

Reaktionen der Konvergenzrate auf wechselnde Feuchtegehalte sind zwar in den Konvergenzansätzen nach Stelte und im alternativen Konvergenzansatz nicht vorgesehen, könnten aber vermutlich ohne große Schwierigkeiten durch einen feuchtabhängigen Übergang zwischen den Parametersätzen für feuchten und trockenen Versatz eingeführt werden.

Das eigentliche Problem bei der Beschreibung der Feuchteabhängigkeit liegt in der geringen experimentellen Datenbasis zur Quantifizierung dieser Abhängigkeit. Unklar ist, ob die Lokalisation des Wassers im Korngefüge eine Rolle spielt. Bei einem gering kompaktierten Versatz könnte Wasserdampf, der über den Porenraum eingetragen wird, einen höheren Anteil an Kornflächen erreichen als in einem stärker kompaktierten Versatz.

Anpassungsfunktion

Die Konvergenzansätze nach Stelte sind tendenziell als Anpassungsfunktionen zu verstehen, da sie die kausalen physikalischen Zusammenhänge beim Konvergenz-Kompaktions-Prozess für manche Situationen (z. B. für inhomogene oder instationäre Temperaturfelder) sehr stark vereinfachen. Aber auch reine Anpassungsfunktionen können gute Prognosewerkzeuge sein, wenn ihr Wert durch erfolgreiche Vorhersagen bestätigt wird. Erfolgreiche Vorhersagen mit dem erweiterten Stelte-Ansatz gelangen zum Beispiel in den im Projekt PAMINA durchgeführten Benchmark-Rechnungen /BUH 09/. Diese zeigten, dass die im Ansatz enthaltenen funktionalen Zusammenhänge die Einflüsse von Porosität, Druck und Zeit gut beschreiben können. Die in /BUH 09/ behandelten Testfälle beschränken sich jedoch auf isotrope Spannungsverhältnisse und konstante, homogene Temperaturen. Die Anwendbarkeit des erweiterten Stelte-Ansatzes auch bei anisotropen Spannungen und instationären, inhomogenen Temperaturverhältnissen ist nach Kenntnis des Verfassers bisher nicht untersucht worden.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Bei der Einlagerung radioaktive Abfälle in das Wirtsgestein Steinsalz ist die konvergenzbedingte Kompaktion des Salzgrusversatzes ein wichtiger Prozess zum langfristigen hydraulischen Verschluss des Endlagers. In Langzeitsicherheitsanalysen kann dieser Prozess wegen der begrenzten Rechenleistung oft nur in vereinfachter Weise betrachtet werden. Hierzu wird ein Konvergenzansatz verwendet, der die Konvergenzrate, also die relative Verkleinerung des Hohlraumvolumens pro Zeiteinheit, in vereinfachter Weise berechnet.

In der vorliegenden Arbeit erfolgte eine nähere Betrachtung des Konvergenzansatzes von Stelle /STE 85/ (auch „PSE-Ansatz“ genannt /RÜB 10/) sowie der im Vorhaben 02 E 9239 „Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern“ des Bundesministeriums für Wirtschaft und Arbeit (BMWA) durchgeführten Erweiterung dieses Konvergenzansatzes /NOS 05/. Diese beiden Konvergenzansätze nach Stelle sind in Teilen deskriptive Ansätze zur Erfassung des Konvergenz-Kompaktions-Vorgangs, die über Kurvenanpassungen an gebirgsmechanischen Simulationsergebnissen kalibriert werden müssen. Der deskriptive Charakter der beiden Ansätze rührt daher, dass sie bei der Herleitung einige Annahmen verwenden, die mit den in einem Endlager zu erwartenden Zuständen und Vorgängen nicht leicht in Einklang zu bringen sind. Dies betrifft vor allem die Erfassung des Temperatureinflusses auf die Konvergenz und beim ursprünglichen Stelle-Ansatz auch das mechanische Verhalten des Versatzes. Zur Beschreibung des Versatzverhaltens wurde beim erweiterten Stelle-Ansatz ein flexiblerer Ansatz gewählt.

Im Rahmen des Projektes PAMINA konnte der erweiterte Stelle-Ansatz seine Fähigkeit zur Prognose der Druck-, Zeit-, und Porositätsabhängigkeit der Konvergenzrate zeigen /BUH 09/. Die betreffenden Untersuchungen verwendeten allerdings ein vereinfachtes System mit stationärer, homogener Temperaturverteilung und isotropen Gebirgsspannungen. Eine Prüfung, ob der erweiterte Stelle-Ansatzes auch bei instationär-inhomogenen Temperaturfeldern prognostisch anwendbar ist, steht noch aus.

Die vorliegende Arbeit zeigt, dass bei der praktischen Anwendung aller hier vorgestellten Konvergenzansätze folgende Punkte beachtet werden müssen:

- Das Kriechen des Steinsalzes besitzt eine starke Temperaturabhängigkeit. Die Eignung der Ansätze zur Beschreibung des Einflusses inhomogen-instationärer Temperaturfelder auf die Konvergenzrate wurde nach Kenntnis des Verfassers bisher nicht geprüft. Bei inhomogenen Temperaturfeldern – vor allem, wenn sie instationär sind – ist die physikalische Bedeutung und Ermittelbarkeit der in den Ansätzen verwendeten repräsentativen Temperaturen nicht offensichtlich.
- Die experimentelle Datenbasis zum mechanischen Verhalten des Salzgrusversatzes ist für kleine Porositäten (< 10%) noch sehr schwach. Dies betrifft auch die Korrelation zwischen der Porosität und der Permeabilität, wenn die Porosität sehr klein wird (wenige Prozent) und der verminderte Grad der Porenvernetzung eine Rolle zu spielen beginnt.
- Die Porositätsverteilung über einen Streckenquerschnitt kann inhomogen sein, vor allem, wenn der Stützdruck des Versatzes noch gering ist oder über den Streckenquerschnitt inhomogene Temperaturen herrschen. Dies hat Auswirkungen auf die streckenparallele effektive Permeabilität.
- Die Konvergenzrate hängt von der Hohlraumgeometrie ab. Daher benötigen die Konvergenzansätze bei der Anwendung auf Strecken und Kammern unterschiedliche Parameterwerte.
- Bereits geringe Feuchtegehalte von ca. 0,4 Gew.-% /SAL 07/ können die Stützwirkung des Versatzes drastisch vermindern. Der Wechsel von trockenen zu etwas feuchteren Bedingungen wird in den Konvergenzansätzen nicht funktional erfasst. Ein solcher Wechsel könnte im Endlager aber durch das Eindringen von Lösung oder durch den Transport von Wasserdampf stattfinden. Die Datenbasis zur Quantifizierung der Feuchteabhängigkeit ist derzeit noch sehr lückenhaft.

Die Unsicherheit bezüglich des Einflusses inhomogen-instationärer Temperaturfelder fällt wegen der starken Temperaturabhängigkeit des Salzkriechens stark ins Gewicht. In einem Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle dürfte dies vor allem in der ersten Zeit nach Verschluss des Endlagers der Fall sein, in der die räumlichen und zeitlichen Temperaturänderungen ausgeprägt sind und die geringe Stützwirkung des Versatzes hohe Konvergenzraten ermöglicht. Die Unsicherheit bezüglich des Temperatureinflus-

ses impliziert eine Unsicherheit hinsichtlich der Geschwindigkeit des Gasdruckaufbaus und der Richtung und Stärke der Gasflüsse.

Für die Bestimmung der Zeitdauer bis zum Erreichen eines hydraulischen Verschlusses dürfte vor allem die Unsicherheit bei der Erfassung des Salzgrusverhaltens relevant sein. Diese Unsicherheit ist größtenteils experimentellen Problemen bei der Untersuchung des langfristigen Kompaktionsverhaltens geschuldet.

Wegen der örtlich variierenden Materialien sowie thermischen, mechanischen und hydraulischen Bedingungen in einem Endlager ist mit lokalen Unterschieden bei der Konvergenz der Grubenhohlräume zu rechnen. Nicht alle dieser Bedingungen können experimentell oder durch detaillierte gebirgsmechanische Simulationen untersucht werden. Konvergenzansätze müssen also Extrapolationen zu nicht beobachteten Bedingungen durchführen. Das Vertrauen in die Extrapolationsfähigkeit eines Konvergenzansatzes kann sich auf erfolgreiche Prognoserechnungen gründen. Es ist ebenfalls vorteilhaft, wenn der Konvergenzansatz nicht nur deskriptiven Charakter hat, sondern kausale physikalische Zusammenhänge erfasst.

Im vorliegenden Vorhaben wurde daher ein alternativer Konvergenzansatz entwickelt, der die Verwendung unabhängiger Materialgesetze für die Konvergenz des Gebirges und die Kompaktion des Versatzes erlaubt und die Konvergenzraten anhand dieser Materialgesetze berechnet. Mit diesem Konvergenzansatz ist es möglich, experimentelle Daten zum Versatzverhalten direkt zur Kalibration des Konvergenzansatzes zu verwenden, was bei den beiden Konvergenzansätzen nach Stelte nicht der Fall ist. Der alternative Konvergenzansatz teilt allerdings die temperaturbezogenen Einschränkungen dieser Ansätze und ist daher nur als ein Teilschritt zu einem differenzierteren Konvergenzansatz anzusehen. Eine praktische Prüfung des alternativen Ansatzes steht noch aus.

Die vorliegende Arbeit zeigt die Notwendigkeit zur Weiterentwicklung der Verfahren zur vereinfachten Konvergenzberechnung auf. Eine Weiterentwicklung scheint dabei auf verschiedenen Wegen möglich zu sein. Die im Vorhaben VSG gewählte Beschreibung der Temperatur- und Feuchteabhängigkeit mit Hilfe von Temperatur-Feuchte-Klassen ist ein Verfahren, das den Transparenzansprüchen des Langzeitsicherheitsnachweises insofern gerecht wird, als dass es die Existenz der diesbezüglichen Unsicherheiten sehr deutlich zum Ausdruck bringt. Auf der anderen Seite nimmt das Verfahren aber auch eine starke Streuung bei der Berechnung der Konvergenzraten in Kauf. Aus die-

sem Grund wäre die Entwicklung eines Konvergenzansatzes wünschenswert, der den Einfluss der Temperatur auf die Konvergenzrate präziser erfassen kann als dies derzeit bei den Konvergenzansätzen nach Stelte und bei dem hier vorgestellten alternativen Konvergenzansatz der Fall ist.

Zur Entwicklung eines solchen Ansatzes könnten detaillierte gebirgsmechanische Simulationen beitragen, indem sie die wesentlichen Merkmale instationärer, inhomogener Temperaturfelder identifizieren, die für die Konvergenzrate bestimmend sind. Diese Zusammenhänge könnten dann in vereinfachter Form in die bestehenden Konvergenzsätze oder in einem neuen Ansatz implementiert werden. Möglicherweise bringen aber auch etwas komplexere Konvergenzansätze einen Fortschritt, die den Einfluss inhomogener, instationärer Temperaturfelder mit Hilfe einfacher kontinuumsphysikalischer Modelle beschreiben.

Auch der Einfluss anisotroper und inhomogener Spannungszustände auf die Konvergenzrate ist wenig erforscht. Diesen zu erfassen wäre ebenfalls ein wichtiger Bestandteil zukünftiger Forschung und Entwicklung zur vereinfachten Beschreibung des Konvergenzverhaltens salzgrusgefüllter Hohlräume im Wirtsgestein Steinsalz.

Dank

Einen herzlichen Dank an Stephan Hotzel für die sehr gründliche und kritische Durchsicht des Berichtes und die vielen wertvollen Kommentare.

Literaturverzeichnis

Die unten aufgeführten GRS-A-Berichte sind im Auftrag des BMU erstellt worden. Der Auftraggeber behält sich alle Rechte vor. Insbesondere dürfen solche Berichte nur mit seiner Zustimmung zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt bzw. Dritten zugänglich gemacht werden.

- /BRÜ 85/ Brüggemann, R. H., S.; Kaschianian, B.; Kühle, R.; Nies, A.; Ohme, G.; Pattlock, F.; Podtschaske, T.; Rimkus, D.; Stelle, N.; Storck, R.: Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE): Abschlussbericht, Fachband 16: Modellansätze und Ergebnisse zur Radionuklidfreisetzung aus einem Modellsalzstock. Vol. 16, Technische Universität Berlin, Berlin, 1985.
- /BUH 09/ Buhmann, D., Grupa, J., Hart, J., Hirsekorn, R.-P., Ionescu, A., Lerch, C., Rübél, A., Schneider, A., Schröder, T. J.: Report on the benchmarks on rock salt. PAMINA - Performance Assessment Methodologies in Application to Guide the Development of the Safety Case, Deliverable D4.1.1, 2009.
- /COD 02/ CODE-BRIGHT: A 3-D program for thermo-hydro-mechanical analysis in geological media. User's Guide, Universidad Politécnica de Cataluña (UPC), 2002.
- /DRO 01/ Droste, J., Feddersen, H.-K., Rothfuchs, T., Lerch, C.: Experimental Investigations on the Backfill Behaviour in Disposal Drifts in Rock Salt (VVS-Project). GRS-173, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2001.
- /FIS 13/ Fischer-Appelt, K., Baltés, B., Larue, J., Mönig, J.: Synthesebericht für die VSG. Bericht zum Arbeitspaket 13, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben GRS-290, ISBN: 978-3-939355-66-3, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2013.
- /HIR 96/ Hirsekorn, R.-P., Ch., T.: Auswertung von In-situ-Konvergenz-Daten und Ableitung eines Konvergenzansatzes. 39 Seiten, GRS-133, 1996.

- /HIR 99/ Hirsekorn, R.-P., Boese, B., Buhmann, D.: Modellierung der Konvergenz von Salzgestein in LOPOS: Programm zur Berechnung der Schadstofffreisetzung aus netzwerkartigen Grubengebäuden. GRS-157, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 1999.
- /HUN 99/ Hunsche, U., Hampel, A.: Rock salt - the mechanical properties of the host rock material for a radioactive waste repository. Engineering Geology, Vol. 52, No. 3, S. 271-291, 1999.
- /KOC 12/ Kock, I., Eickemeier, R., Frieling, G., Heusermann, S., Knauth, M., Minkley, W., Navarro, M., Nipp, H.-K., Vogel, P.: Integritätsanalyse der geologischen Barriere. Bericht zum Arbeitspaket 9.1, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-286, ISBN: 978-3-939355-62-5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012.
- /KRÖ 09/ Kröhn, K.-P., Stührenberg, D., Herklotz, M., Heemann, U., Lerch, C., Xie, M.: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz, REPOPERM - Phase 1. Abschlussbericht, GRS-254, ISBN 978-3-939355-29-8, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), DBE TECHNOLOGY GmbH, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2009.
- /LAR 13/ Larue, J., Baltés, B., Fischer, H., Frieling, G., Kock, I., Navarro, M., Seher, H.: Radiologische Konsequenzenanalyse. Bericht zum Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-289, ISBN 978-3-939355-65-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2013.
- /MAR 96/ Martens, K.-H., Fischer, H., Romstedt, P.: Beschreibung des Rechenprogrammes MARNIE. 88 Seiten, GRS-A-2426, 1996.
- /MAR 02/ Martens, K.-H., Fischer, H., Romstedt, P.: Beschreibung des Rechenprogrammes MARNIE. 135 Seiten, GRS-A-3027, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2002.

- /NAV 13/ Navarro, M.: Erweiterungen des Codes TOUGH2 zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Endlagern, In Vorbereitung. In Vorbereitung als Bericht zum Vorhaben 3609R03210 „Forschung und Entwicklung zum Nachweis der Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2013.
- /NOS 05/ Noseck, U., Brewitz, W., Becker, D.-A., Buhmann, D., Fahrenholz, C., Fein, E., Hirsekorn, P., Keesmann, S., Kröhn, K.-P., Müller-Lyda, I., Rübel, A., Schneider, A., Storck, R.: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern. GRS-204, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2005.
- /RÜB 10/ Rübel, A., Mönig, J.: Prozesse, Modellkonzepte und sicherheitsanalytische Rechnungen für ein Endlager im Salz. 142 Seiten, GRS-A-3521, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2010.
- /SAL 07/ Salzer, K., Popp, T., Böhnel, H.: Investigation of the Mechanical Behaviour of Precompacted Crushed Salt in Contact to the Host Rock. NF-PRO Deliverable 3.5.6, 2007.
- /STE 85/ Stelte, N.: Analytische Approximation der Konvergenzrate salzgrusversetzter und unter hydraulischem Druck stehender Hohlräume im Salzgestein. Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Abschlussbericht, Fachband 15: Einzeluntersuchungen zur Radionuklidfreisetzung aus einem Modellsalzstock, Vol. 15, S. 108-141, 1985.
- /ZHA 93/ Zhang, C., Schmidt, M. W., Staupendahl, G., Heemann, U.: Entwicklung eines Stoffansatzes zur Beschreibung des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus. 60 S. Seiten, ISBN 3-926031-73-5, 1993.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Eindimensionales Modellgitter einer mit Salzgrus verfüllten Strecke zur Illustration einer typischen Anwendung des Konvergenzansatzes	2
Abb. 2.1	Stark idealisiertes Kornmodell, das Stelte /STE 85/ zur Abschätzung der Flächenporosität und der Geometriefunktion verwendet	10
Abb. 5.1	Berechnung der Salzgruskompaktion mit Code_Bright (aus /LAR 13/)	22
Abb. 5.2	Entwicklung der Konvergenzrate für verschiedene Versatzmodelle und Feuchtegrade (Alle Simulationen enden bei einer Porosität von 1 %).....	30
Abb. 5.3	Porositätsentwicklung für verschiedene Versatzmodelle und Feuchtegrade	30

Tabellenverzeichnis

Tab. 5.1	Parameter zur Kalibrierung des Konvergenzansatzes (nach /LAR 13/)	23
Tab. 5.2	Ergebnis der Kalibrierung des Faktors f_{loc} (nach /LAR 13/)	23

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de