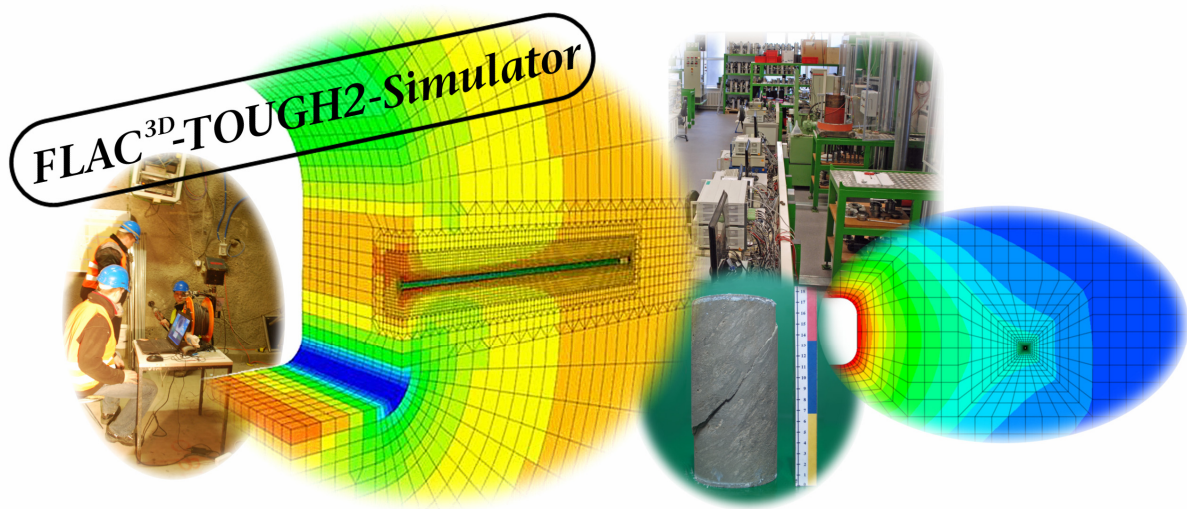

Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik Technische Universität Clausthal

**Kopplung der Softwarecodes FLAC^{3D} und TOUGH2
in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Unter-
suchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten
Verhalten von Tongestein unter Endlagerbedingungen**

(THM-Kopplung FLAC^{3D}-TOUGH2 / Tongestein)

**Teil II: Physikalische Modellierung, Kopplung von
FLAC^{3D} und TOUGH2 sowie numerische Simulationen**



**Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben
mit dem Förderkennzeichen 02E11041
Zeitraum: 01.10.2011 - 31.03.2015**





Abschlussbericht

zum BMWi-Forschungsvorhaben

Kopplung der Softwarecodes FLAC^{3D} und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Unter- suchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten von Tongestein unter Endlagerbedingungen

(Berichtsteil II von II)

Förderkennzeichen: 02E11041

Zeitraum: 01.10.2011 - 31.03.2015

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

Sachbearbeiter: Dipl.-Math. M. Rutenberg
Dipl.-Ing. R. Seeska
Dipl.-Math. J. Feierabend
apl. Prof. Dr.-Ing. habil. U. Düsterloh

Clausthal-Zellerfeld, im September 2015

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

.....
Dipl.-Ing. R. Seeska

.....
Dipl.-Math. J. Feierabend

.....
apl. Prof. Dr.-Ing. habil. U. Düsterloh

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

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Förderkennzeichen 02E11041, Laufzeit 01.10.2011 bis 31.03.2015, gefördert.

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





Zusammenfassung der Forschungsergebnisse

Forschung und Erfahrung mit dem Tragverhalten von Hohlräumen im Tonsteingebirge haben in den vergangenen Jahren bis Jahrzehnten gezeigt, dass im Porenraum von Tongesteinsformationen bereits primär vorhandene Fluide einen wesentlichen Einfluss auf das Trag- und Deformationsverhalten von Hohlräumen in diesem Formationstyp ausüben. Porenwasserdruck, effektive Spannungen und Entsättigung mit Schrumpfrissbildungen, gegebenenfalls Re-Sättigung mit Quellvorgängen sind hier Stichworte. Dasselbe gilt für sekundäre Fluide wie die Gase, die im Rahmen der untertägigen Endlagerung radioaktiver Abfälle in verfüllten Einlagerungshohlräumen bei der Korrosion der metallenen Abfallbehälter infolge der anfänglichen Restfeuchtigkeit des Verfüllmaterials und später infolge des möglicherweise zutretenden primären Formationswassers entstehen. Die sich in den Poren- und/oder Zwischenräumen des Versatzmaterials ansammelnden Gasmengen können im Verlauf der Nachbetriebsphase des Endlagers zunächst im Versatzmaterial und dann im Wirtsgestein zu einem Druckanstieg führen, welcher seinerseits das mechanische Verhalten des Wirtsgesteins signifikant beeinflussen kann. Rissbildungen und verstärkte Fluidmigrationen in Verbindung mit einem Transport von Radionukliden aus den Abfällen können im ungünstigen Fall die Folge sein. Hinzu kommen bedingt durch die Wärmeentwicklung der radioaktiven Abfälle thermische Effekte, die das hydraulische Strömungsverhalten beeinflussen und bei unzureichender Wärmeableitung zum Verdampfen des Porenwassers und damit zu einem zusätzlichen Ansteigen des Gasphasendrucks führen. Daher muss im Hinblick auf eine das Langzeitverhalten eines Endlagers im Tongestein behandelnde Sicherheitsanalyse das gekoppelte thermisch-hydraulisch-mechanische (THM) Verhalten des Tongesteins untersucht sowie physikalisch modelliert werden. Prozessverständnis und physikalische Modellierung sowie numerische Simulation des Endlagersystemverhaltens bzw. seiner wesentlichen Teilkomponenten bei Ansatz thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelter Prozesse mit Zweiphasenfluss (TH²M) sind dann zentraler Bestandteil der Langzeitsicherheitsanalyse. Vor diesem komplexen Hintergrund ist das Forschungsvorhaben durch zwei Hauptziele geprägt:

- (1) Entwicklung eines Simulators zur Analyse TH²M-gekoppelter Prozesse im Tonsteingebirge,
- (2) Weiterführung von Bohrlochmessungen zur Analyse des Gebirgstragverhaltens in Tonsteinformationen und Vertiefung laborativer Befunde.



Im Rahmen des ersten Hauptziels dieses Forschungsvorhabens ist ein aus den beiden bewährten Simulationsprogrammen FLAC^{3D} (für geomechanische Analysen) und TOUGH2 (für thermohydraulische Analysen) gekoppelter neuer Simulator für thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Prozesssimulationen im Bereich der untertägigen Endlagerung radioaktiver Abfälle entwickelt worden. Mit dem FLAC^{3D}-TOUGH2-Kopplungs- oder kurz FTK-Simulator ist es nun grundsätzlich möglich, für ein Endlager(teil)system sowohl das mechanische Trag- und Deformationsverhalten unter Berücksichtigung von sich ändernden Porenflüddrücken und Sättigungsgraden (Zweiphasenfluss) wie auch das durch Kompaktionen und Expansionen der Gesteinsmatrix beeinflusste thermohydraulische Strömungsverhalten numerisch zu analysieren.

Im Rahmen des zweiten Hauptziels sind auf den vorangehenden BfS- und BMWi-Forschungsvorhaben 3607R02596 bzw. 02E10427 aufbauend in situ-Untersuchungen zum zeitabhängigen Bohrlochtrag- und -deformationsverhalten in den Untertagelaboren Mont Terri (Schweiz) und Tournemire (Frankreich) durchgeführt worden. Resultate aus den genannten vorangehenden Vorhaben konnten dabei u.a. anhand von Beobachtungen und Messungen in im Rahmen dieses Vorhabens 02E11041 neu abgeteufte Bohrlöchern bestätigt und damit hinsichtlich des Einflusses des Porenwassers auf das mechanische Verhalten deutlich klarer systematisiert werden. Insgesamt sind aber auch insbesondere mit Blick auf den erst seit 2008 besser erschlossenen Bereich westlich der Hauptstörungszone der Lokation Tournemire unerwartete Entwicklungen im Gebirgsverhalten eingetreten. Darüber hinaus sind laborative Untersuchungen an Opalinustonprüfkörpern aus den neu abgeteufte Bohrlöchern der Lokation Mont Terri (tonige Fazies) durchgeführt worden, bei denen der Einfluss von Luftfeuchtigkeit auf das Materialverhalten im Fokus stand. Zusätzlich konnten sowohl im Rahmen der in situ-Untersuchungen wie auch über die laborativen Untersuchungen neue Erkenntnisse über die bislang nur wenig erforschten sandigen und karbonatreich-sandigen Fazies des Opalinustons der Lokation Mont Terri gewonnen werden.

Die wesentlichen Ergebnisse aus den unterschiedlichen Bearbeitungsschwerpunkten dieses Forschungsvorhabens können wie folgt zusammengefasst werden:

- Durch die in den vergangenen fünf Jahren durchgeführten in situ-Untersuchungen in insgesamt sieben Observationsbohrlöchern innerhalb der Niche MI des URL Mont Terri, von denen vier im Rahmen dieses Vorhabens abgeteuft worden sind, ist es zum jetzigen Zeitpunkt erstmals möglich, reproduzierbare Muster bezüglich des Langzeittragver-



haltens innerhalb von identisch orientierten Observationsbohrlöchern zu identifizieren. Während sich beispielsweise die Bohrlochwand im innerhalb der karbonatreichen sandigen Fazies gelegenen Bohrlochbereich in den vier schichtungsorthogonal orientierten Bohrlöchern als standfest erweist, kommt es im innerhalb der tonigen Fazies gelegenen Bohrlochbereich in diesen Bohrlöchern zu großen Schädigungen in der Bohrlochwand, die sich vor allem unmittelbar am Faziesübergang ereignen und sich von dort aus im Verlauf der Zeit innerhalb dieser Fazies weiter fortpflanzen. Als neues Forschungsergebnis konnten in der sandigen Fazies generell verstärkt Sickerwasserzutritte beobachtet werden, wobei sich diese Fazies im Vergleich insbesondere zur tonigen Fazies als deutlich standfester erwiesen hat.

- Die in situ-Untersuchungen im URL Tournemire haben einerseits bestehende Trends wie z.B. die schon früher beobachtete hydraulisch-mechanische Standfestigkeit der Bohrlöcher östlich der Hauptstörungszone bestätigt. Andererseits haben die Observationen in den Bohrlöchern westlich dieser Störungszone aufgezeigt, dass auch in einer verfestigten Tongesteinsformation wie dem Toarcium-Tonstein hydraulische Aktivitäten in Verbindung mit Schädigungen an Hohlraumkonturen möglich sind. Diese hydraulischen Aktivitäten, die mit einer Schwächezone im Gebirge in Verbindung gebracht werden, sind überdies mit zeitlich wechselnden Trends aufgetreten.
- An dem erhaltenen Bohrkernmaterial der Lokation Mont Terri sind laborative ein- und triaxiale Langzeituntersuchungen durchgeführt worden. In den aus den einaxialen Langzeituntersuchungen in einer Klimakammer erhaltenen Verzerrungs-Zeit-Graphen unter variierten, aber jeweils konstanten Umgebungsluftfeuchtigkeiten haben die Deformationen bei dem vorgegebenen Beanspruchungsniveau bereits nach kurzer Zeit einen augenscheinlich nahezu stationären Zustand erreicht, so dass weder Desintegrationsprozesse noch Konsolidations- oder (stationäre) Kriechprozesse aus ihnen abgeleitet werden konnten. Auch ist die Abhängigkeit des Materialverhaltens von der Luftfeuchtigkeit anscheinend deutlich weniger ausgeprägt als die Abhängigkeit von der Entnahmeposition des Prüfkörpermaterials aus dem Bohrloch. Eine Ausnahme bildet hierbei der Luftfeuchtigkeitsbereich von $R_H \geq 95\%$, bei dem eine offensichtlich durch Quellungsprozesse induzierte Prüfkörperextension gemessen worden ist. Aus den Ergebnissen eines mehr als einjährigen Langzeittriaxialversuchs konnte kein eindeutiges Anzeichen für Kriechprozesse im Opalinuston gefunden werden.



- Der neu entwickelte FTK-Simulator ermöglicht numerisch effektive TH¹M- und TH²M-gekoppelte Prozessanalysen (mit Ein- bzw. Zweiphasenflussprozessen). Mit diesem Simulator wird die Benutzeroberfläche und die geomechanische Berechnungseinheit von FLAC^{3D} mit unterschiedlichen thermohydraulischen Modulen aus TOUGH2 gekoppelt, derzeit z.B. mit dem isothermen Einphasenflussmodul oder mit dem TH-gekoppelten Zweiphasenflussmodul Wasser/Luft. Erweiterungen auf andere TOUGH2-Module sind damit prinzipiell möglich, ebenso wie benutzerfreundliche thermohydraulische Simulationen, die durch die Steuerung von FLAC^{3D} überdies robuster als übliche TOUGH2-Simulationen gegenüber numerischen Instabilitäten sind. Verifizierungen mit dem Einphasenflussmodul haben dabei insgesamt die korrekte Funktionsweise des Simulators auf eine sehr zufriedenstellende Weise bestätigen können (auch mit Blick auf die Simulationsdauer bei größeren Berechnungsmodellen), während Verifizierungen bzw. Validierungen zum Zweiphasenflussmodul bislang nur ansatzweise durchgeführt werden konnten. Ein beim Vorhabensbearbeiter vorliegender weiterer Zweiphasenflusssimulator hat sich aufgrund mangelnder Leistungsfähigkeit dabei als wenig hilfreich erwiesen. Insbesondere im Bereich der hydraulischen Anisotropie ist ein bedeutendes Entwicklungspotential für den FTK-Simulator identifiziert worden. Zur umfassenden Validierung des FTK-Simulators und auch zur Erweiterung und Festigung der in diesem Vorhaben erlangten Erfahrungen sind zukünftig weitere Arbeiten erforderlich, die z.B. im Rahmen eines Simulatoren-Benchmarkings in Zusammenarbeit mit externen Partnerorganisationen denkbar wären. Erste Kooperationen mit externen Organisationen mit Kenntnissen auf dem Fachgebiet der Geohydraulik haben sich bereits als sehr förderlich für das Verständnis insbesondere hinsichtlich der Zweiphasenflussprozesse (H²-Prozesse) erwiesen.



Summary of the research findings

In the last years and decades, research and experience with the load-bearing behaviour of excavations in claystone host rock have revealed that the primary fluids already present in the pore space of argillaceous rock mass have a major influence on the load-bearing and deformation behaviour of excavations in this type of rock mass. Pore-water pressure, effective stresses, desaturation with development of shrinkage cracks as well as possible resaturation and swelling processes are keywords in this context. The same applies to secondary fluids like gases generated by radioactive waste emplaced in backfilled storage chambers in underground waste repositories: the gases arise from the corrosion of metal waste containers reacting with the initial residual moisture of the backfill material, and later on as a consequence of the possible influx of primary water from the host rock. The volumes of gas accumulating in the pore space and/or the interstitial spaces of the backfill material could lead to a rise in pressure during the course of the post-operational phase of the repository, initially in the backfill material and then in the host rock. This rise in pressure could have a significant influence on the mechanical behaviour of the rock mass. In the most unfavourable scenario, this could lead to the development of fractures and intensified fluid migration, combined with the mobilisation of radionuclides from the waste. In addition, the generation of heat by the radioactive waste gives rise to thermal effects which influence the hydraulic flow behaviour, which could in case of insufficient heat dissipation lead to the evaporation of pore water and thus to an additional rise in the pressure of the gaseous phase. The safety analysis of the long-term behaviour of a repository in argillaceous rocks must therefore include the investigation and physical modelling of the coupled thermal-hydraulic-mechanical (THM) behaviour of the argillaceous rock. Key parts of the long-term safety analysis would therefore include an understanding of the processes involved, physical modelling, and numerical simulation of the repository system behaviour and/or its main subcomponents involving coupled thermal-hydraulic-mechanical processes with two-phase flow (TH²M). Against this complex background, the research project is characterised by two main objectives:

- (1) Development of a simulator for the analysis of coupled TH²M processes in claystone host rock,
- (2) Continuation of borehole investigations to analyse the load-bearing behaviour in claystone rock mass and improvement of knowledge based on laboratory investigations.



As part of the first main objectives of this research project, a coupled new simulator for thermal-hydraulic-mechanical coupled process simulations looking at the deep geological disposal of radioactive waste was developed from the two well-established simulation programs FLAC^{3D} (for geomechanical analysis) and TOUGH2 (for thermohydraulic analysis). By using the FLAC^{3D}-TOUGH2-coupling simulator (named “FTK-Simulator”) it is now basically possible to numerically analyse the mechanical load-bearing and deformation behaviour of a modelled repository (sub)system, taking into consideration the varying pore-fluid pressures and saturations (two-phase flow), as well as the thermohydraulic flow behaviour affected by the compaction and expansion of the rock matrix.

The second main objective involved the implementation of in-situ investigations on time-dependent borehole load-bearing and deformation behaviour in the underground research laboratories (URL) Mont Terri (Switzerland) and Tournemire (France) which followed up on the previous BfS and BMWi research projects 3607R02596 and 02E10427, respectively. The findings from the aforementioned projects were confirmed by, amongst other aspects, the observations and measurements in the new boreholes drilled as part of this project (02E11041), and could therefore be much more clearly systematised with respect to the influence of the pore water on the mechanical behaviour. Overall however, unexpected developments of the rock-mass behaviour also occurred, especially in the zone to the west of the main fault zone in the Tournemire location, where better access has only been created since 2008. In addition, laboratory investigations on Opalinus Clay specimens from the recently drilled boreholes at the Mont Terri location (shaly facies) were undertaken with a special focus on the influence of air humidity on the material behaviour. Moreover, the in-situ investigations, as well as the laboratory investigations, generated new findings on the previously only slightly researched sandy and carbonate-rich sandy facies of the Opalinus Clay in URL Mont Terri.

The main findings from the various main research aspects of this research project are summarised as follows:

- Thanks to the in situ investigations carried out in the last five years in seven observation boreholes in Niche MI at URL Mont Terri, four of which have been drilled in the context of this project, it is now possible for the first time to identify reproducible patterns with respect to the long-term load-bearing behaviour within identically oriented observation boreholes. For instance, whilst the borehole walls of the part of the borehole drilled within the carbonate-rich sandy facies in the four bedding-parallel boreholes



proved to be stable, the borehole walls of the parts of these boreholes drilled within the shaly facies suffered a great deal of damage—which mainly occurs directly along the transition zones between these facies, and then propagates within the shaly facies from this starting point over the course of time. One of the new research findings was that there is a general stronger influx of percolating water within the sandy facies, even though this facies proves to be much more stable, particularly when compared to the shaly facies.

- The in situ investigations in URL Tournemire verified on the one hand the previously observed trends, such as the hydraulic-mechanical stability of the boreholes lying to the east of the main fault zone. On the other hand, the observations in the boreholes lying to the west of this fault zone revealed that hydraulic activity is also possible in connection with damage to the walls of cavities, even in consolidated argillaceous rock masses such as the Toarcian claystone. This hydraulic activity, which is associated with a zone of weakness within the rock mass, also occurred in a temporally varying manner.
- Uniaxial and triaxial long-term laboratory tests have been performed on the obtained drill-core material from URL Mont Terri. In the strain-time graphs derived from the uniaxial long-term tests under varying, but in each case constant ambient air humidity levels in a climatic chamber, the deformations for each preset load level have apparently reached almost steady state so quickly that it was not possible to use them to deduce any disintegration, consolidation, or (stationary) creep processes. The dependence of the material behaviour on the air humidity was also apparently much less than the dependence on the position from which the test specimen was extracted in the borehole, the one exception being the air humidity level of $R_H \geq 95\%$, where extension of the test specimen was measured which was obviously induced by swelling processes. Within the results of the triaxial long-term test which lasted for more than one year, no clear sign for creep processes in Opalinus Clay could be found.
- The newly developed FTK-Simulator enables numerical effective analyses of coupled TH¹M and TH²M processes (including single- and two-phase fluid flow, respectively). By means of this simulator, the user interface and the geomechanical calculation unit of FLAC^{3D} is coupled with different thermohydraulic modules from TOUGH2, e.g. currently with the isothermal single-phase flow module, or with the TH-coupled two-phase water/air flow module. Extensions to other TOUGH2 modules are therefore possible in



principle, as are user-friendly thermohydraulic simulations which become more robust against numerical instabilities compared to usual TOUGH2 simulations because of being controlled by FLAC^{3D}. Verifications with respect to the single-phase flow module overall have very satisfactorily verified the correct functioning of the simulator (also with respect to the time periods of the simulations for larger calculation models). However, verifications or validations with respect to the two-phase flow module could only be carried out to a minor extent up to now. Another two-phase-flow simulator available to the author proved to be of little use in this regard due to lack of efficiency. A considerable potential for further development of the FTK-Simulator has been identified concerning the hydraulic anisotropy. More work will be necessary in future to validate the FTK-Simulator in a comprehensive manner and to extend and strengthen the experience already acquired during the course of the present project, as may be feasible, for instance, as part of a simulator benchmarking process in cooperation with external partner organisations. First cooperations with external organisations with knowledge in the field of geohydraulics have already proved to be conducive for the understanding especially of two-phase flow (H^2) processes.



Inhaltsverzeichnis Teil I

	Zusammenfassung der Forschungsergebnisse	5
	Summary of the research findings	9
	Inhaltsverzeichnis Teil I	13
	Inhaltsverzeichnis Teil II	17
1	Aufgabenstellung und Ziele des Vorhabens	23
1.1	Zielsetzungen und Rahmenbedingungen	23
1.2	Bezug des Vorhabens zu förderpolitischen Zielen des BMWi-Förderprogramms.....	27
1.3	Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele des Vorhabens.....	28
1.4	Arbeitsprogramm	30
2	Zum Stand von Wissenschaft und Technik	41
2.1	In situ- und laborative Untersuchungen	41
2.1.1	Überblick über den internationalen Wissensstand	41
2.1.2	Bisherige Arbeiten und Erfahrungen des Vorhabensbearbeiters	46
2.2	Physikalische Modellierung und numerische Simulation	56
2.2.1	Überblick über den internationalen Wissensstand	56
2.2.2	Bisherige Arbeiten und Erfahrungen des Vorhabensbearbeiters	58
3	SCHWERPUNKT „IN SITU“: Feldmessungen und Kamerabefahrungen in den Untertagelaboren Mont Terri und Tournemire.....	63
3.1	Beobachtung des Langzeittrag- und -deformationsverhaltens von Bohrlöchern im URL Mont Terri im Rahmen des DMB-Experimentes	63
3.1.1	Ziel des Experimentes	63
3.1.2	Lage und Geometrie der untersuchten Bohrlöcher	66
3.1.3	Videobeamungen, Kalibermessungen und Luftfeuchtigkeitsmessungen im Rahmen des DMB-Experimentes in den Bohrlöchern DMB-B1 bis DMB-B4.....	68
3.1.4	Ausgewählte Ergebnisse der Kalibermessungen und der Videobeamungen für das Bohrloch DMB-B1	71
3.1.5	Ausgewählte Ergebnisse der Videobeamungen für das Bohrloch DMB-B2	104



3.1.6	Ausgewählte Ergebnisse der Kalibermessungen, Videobefahrungen und Luftfeuchtmessungen für das Bohrloch DMB-B3	120
3.1.7	Ausgewählte Ergebnisse der Videobefahrungen für das Bohrloch DMB-B4	153
3.1.8	Fazit zu den im Rahmen dieses Vorhabens im URL Mont Terri mit der Dreiarmkalibersonde und der Axial-Bohrlochkamera durchgeführten Bohrlochobservationsarbeiten.....	165
3.2	Beobachtung des Langzeittrag- und -deformationsverhaltens von Bohrlöchern im URL Tournemire.....	186
3.2.1	Ziel der Untersuchungen.....	186
3.2.2	Lage und Geometrie der untersuchten Bohrlöcher	187
3.2.3	GEM-Bohrlöcher in der Gallery 96	197
3.2.4	GSM-Bohrlöcher in der Gallery 08	227
3.2.5	Fazit zu den im Rahmen dieses Vorhabens im URL Tournemire mit der Dreiarmkalibersonde und der Axial-Bohrlochkamera durchgeführten Bohrlochobservationsarbeiten.....	283
4	SCHWERPUNKT „GESTEINSMECHANISCHES LABOR“: Mechanische und hydraulische Untersuchungen an Tonsteinmaterial der Lokation Mont Terri ...	295
4.1	Übersicht über die durchgeführten laborativen Untersuchungen	295
4.2	Zwischenlagerung der Bohrkerne und Herstellung der Prüfkörper	300
4.3	Kurzzeitversuche unter einaxialer Kompressionsbeanspruchung.....	301
4.3.1	Versuchsaufbau und Versuchstechnik	301
4.3.2	Versuchsauswertung	302
4.3.3	Messergebnisse einaxialer Druckversuche	305
4.4	Kurzzeitversuche unter triaxialer Kompressionsbeanspruchung.....	305
4.4.1	Versuchsaufbau und Versuchstechnik	305
4.4.2	Versuchsauswertung	308
4.4.3	Messergebnisse triaxialer Druckversuche.....	308
4.5	Diskussion der Ergebnisse uniaxialer und triaxialer Kurzzeitfestigkeitsversuche unter Kompressionsbeanspruchung	308
4.6	Dauerstandversuche unter einaxialer Kompressionsbeanspruchung mit Regelung der relativen Umgebungsluftfeuchtigkeit	312
4.6.1	Versuchsaufbau und Versuchstechnik	312



4.6.2	Versuchsauswertung	314
4.6.3	Messergebnisse einaxialer Dauerstandversuche mit Regelung der relativen Umgebungsluftfeuchtigkeit.....	315
4.7	Dauerstandversuch unter triaxialer Kompressionsbeanspruchung	322
4.7.1	Versuchsaufbau und Versuchstechnik	322
4.7.2	Versuchsauswertung	325
4.7.3	Ergebnisse des triaxialen Dauerstandversuchs	325
	Literaturverzeichnis zu Teil I	331





Inhaltsverzeichnis Teil II

	Zusammenfassung der Forschungsergebnisse	5
	Summary of the research findings	9
	Inhaltsverzeichnis Teil I	13
	Inhaltsverzeichnis Teil II	17
5	Physikalische Modellierung von im Tongestein auftretenden THM-Prozessen	23
5.1	Konventionen und Notationen	23
5.2	Ungekoppelte THM-Prozesse	24
5.2.1	Mechanischer Prozess	24
5.2.2	Thermischer Prozess	29
5.2.3	Hydraulischer Prozess	31
5.2.3.1	Bilanzgleichungen, Transportgleichungen und Nebenbedingungen	31
5.2.3.2	Relativpermeabilitäten und Kapillardrücke	37
5.3	Zusammenführung der einzelnen Modelle / THM-Kopplungsbeziehungen	48
5.4	Analytische Lösungen zu einfachen Aufgabenstellungen	53
6	SCHWERPUNKT „THM-SIMULATOR“: Entwicklung und Verifizierung des FLAC^{3D}-TOUGH2-Simulators für THM-gekoppelte Prozesse	65
6.1	Überblick über die Programmpakete FLAC ^{3D} und TOUGH2 mit ihren jeweiligen Qualitäten und Anwendungsbereichen.....	65
6.1.1	Software FLAC ^{3D} für geomechanische Aufgabenstellungen	65
6.1.2	Software TOUGH2 für geothermohydraulische Aufgabenstellungen.....	67
6.2	Entwicklung einer Schnittstelle zwischen den Simulatoren FLAC ^{3D} und TOUGH2.....	70
6.2.1	Herangehensweise und Grundstrukturen	70
6.2.2	Modellkonversion	75
6.2.3	Implementierung der THM-Kopplungsbeziehungen	86
6.2.4	Zeitschrittsteuerung.....	90
6.2.5	Ablauf einer THM-gekoppelten Simulation mit dem FTK-Simulator	96
6.2.6	FLAC ^{3D} als Prä- und Postprozessor für TOUGH2 („TOUGH2 aus FLAC ^{3D} “)	101



6.3	Grundlegende hydraulische Berechnungen mit dem Programmpaket TOUGH2 zum Prozessverständnis	104
6.3.1	Einführung	104
6.3.2	Einphasenfluss und Teilsättigung mit passiver Gasphase – EOS-Modul 9	106
6.3.3	Zweiphasenfluss Wasser/Luft – EOS-Modul 3	108
6.3.4	Zweiphasenfluss Wasser/Wasserstoff – EOS-Modul 5	133
6.3.5	Vergleichsberechnungen mit MUFTE-Thermo (Ergebnisse aus <i>Kühle et al.</i> , <i>1999</i>) und FLAC	136
6.3.5.1	Vorbemerkungen.....	136
6.3.5.2	Modellbeschreibung.....	138
6.3.5.3	Berechnung mit dem FTK-Simulator	141
6.3.5.4	Berechnung mit FLAC und Vergleich der Ergebnisse der Simulatoren FTK und FLAC	148
6.3.5.5	Vergleich der Ergebnisse der Simulatoren FTK und MUFTE-Thermo.....	154
6.4	Erste Verifizierung des über die neu entwickelte Schnittstelle gekoppelten FTK-Simulators	160
6.4.1	Methodische Ansätze zur Verifizierung	160
6.4.2	Verifizierung anhand von analytisch lösbaren Beispielmodellen.....	161
6.4.2.1	Übersicht über die Beispielmodelle	161
6.4.2.2	Mechanische Entlastung einer wasserundurchlässigen Tragstruktur.....	163
6.4.2.3	Stark idealisiertes Gebirgsmodell mit Hohlraumausbruch (HM-Entlastung).....	167
6.4.2.4	Konsolidation einer Bodenschicht unter gleichförmiger Belastung	177
6.4.3	Verifizierung anhand von Vergleichsberechnungen mit FLAC ^{3D} – HM-gekopp- pelte Simulationen des Tragverhaltens eines Bohrlochs im hydraulisch-mecha- nischen Nahfeld einer Strecke.....	184
6.4.3.1	Systematik der Vorgehensweise	184
6.4.3.2	Einige Anmerkungen zu den Berechnungsgrundlagen.....	196
6.4.3.3	Berechnungsgrundlagen.....	197
6.4.3.4	Grundlegende Anmerkungen zum Vergleich der Berechnungsergebnisse des FTK-Simulators mit den Berechnungsergebnissen des Simulators FLAC ^{3D}	204
6.4.3.5	Numerische Simulationen mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs	218
6.4.3.6	Dreidimensionale Simulation zum Abteufen eines Bohrlochs	263



6.4.3.7	Quasi-zweidimensionale Simulation des Ausbruchs eines Streckenabschnittes	280
6.4.3.8	Dreidimensionale Simulation zum Abteufen eines Bohrlochs im Nahfeld einer Strecke.....	309
6.4.3.9	Fazit zum Vergleich der Simulatoren FLAC ^{3D} und FTK	365
6.4.3.10	Fazit zur numerischen Analysierbarkeit des Tragverhaltens der Observations- bohrlöcher	372
6.4.3.11	Weiteres Vorgehen.....	375
7	SCHWERPUNKT „BENCHMARKING“: Rechnerische Simulationen zum DMB- Experiment (Mine-by-Test) im URL Mont Terri mit den Simulatoren FTK und CODE_BRIGHT	379
7.1	Vorbemerkungen.....	379
7.2	Aufbau und Ablauf des in situ-Experimentes	379
7.3	Berechnungsgrundlagen und Modellierung	382
7.3.1	Modellierung.....	382
7.3.2	Berechnungsgrundlagen.....	384
7.4	Gegenüberstellung der mit dem FTK-Simulator berechneten Porenwasser- drücke mit den in situ gemessenen Porenwasserdrücken	387
7.5	Weitere ausgewählte Berechnungsergebnisse im Hinblick auf den Vergleich der Simulatoren	397
7.6	Gegenüberstellung von ausgewählten, mit den beiden Simulatoren FTK und CODE_BRIGHT generierten Berechnungsergebnissen	407
7.7	Fazit zur Gegenüberstellung der mit den beiden Simulatoren FTK und CODE_ BRIGHT generierten Berechnungsergebnisse	420
8	Vorbereitungen für einen organisationsübergreifenden Simulatorenver- gleich zur Qualitätssicherung	425
8.1	Motivation und Überblick	425
8.2	Potenzielle Kooperationspartner und ihre Erfahrungen im Bereich der (T)H ² M- Simulation von Endlagerteilsystemen.....	427
8.3	Für den Simulatorenvergleich vorgesehene Beispielm Modelle	430
8.3.1	Zur Auswahl der Modelle	430
8.3.2	Eindimensionale Modelle	431
8.3.3	Zweidimensionale Modelle.....	434

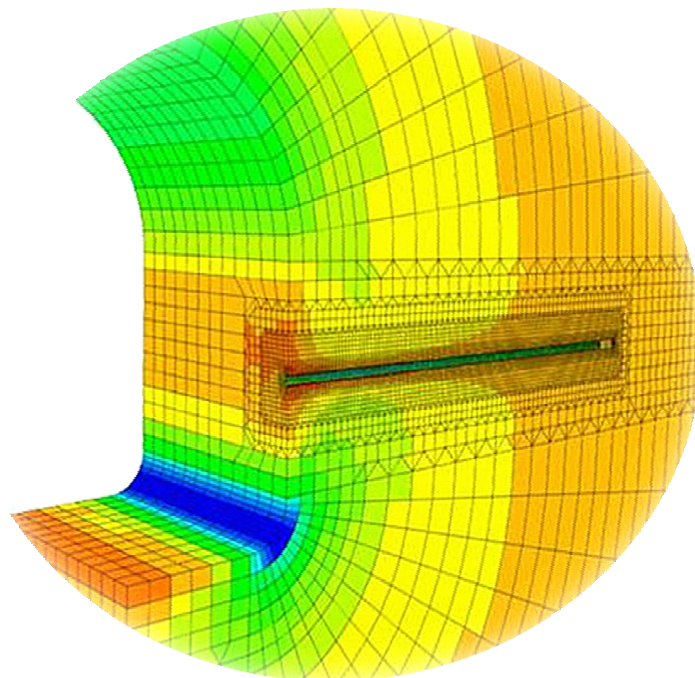


8.3.4	Dreidimensionales Modell	436
8.3.5	Feldexperimente	437
9	Zusammenfassung der Ergebnisse des Projekts mit einigen Anmerkungen für weiterführende Arbeiten	445
9.1	Überblick	445
9.2	Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse zu den Bohrlochobservations- arbeiten im URL Mont Terri	448
9.3	Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse zu den Bohrlochobservations- arbeiten im URL Tournemire	454
9.4	Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse zu den laborativen Unter- suchungen an Opalinustonprüfkörpern aus dem URL Mont Terri	459
9.5	Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse aus der Entwicklung des FTK- Simulators und den numerischen Untersuchungen zur Verifizierung und Vali- dierung des FTK-Simulators	462
10	Danksagung	473
11	Literaturverzeichnis	475



Teil II: Physikalische Modellierung, Kopplung von FLAC^{3D} und TOUGH2 sowie numerische Simulationen

Abschnitte 5 – 11





5 Physikalische Modellierung von im Tongestein auftretenden THM-Prozessen

5.1 Konventionen und Notationen

Mechanische Deformationsprozesse eines geometrischen Modells und damit verbundene Änderungen von physikalischen Eigenschaften können über die *Lagrange*- oder über die *Euler*-Betrachtungsweise in räumliche Abhängigkeit gesetzt werden – eine physikalische Prozessgröße a wird im ersten Fall einem vom System verschobenen und rotierten infinitesimalen materiellen Volumenelement zugeordnet, welches durch seine Position X in der Ausgangskonfiguration des Modells identifiziert wird ($a = a_L(t; X)$), während sie im zweiten Fall in Abhängigkeit eines geometrischen Punktes x der Momentankonfiguration des Modells gesetzt wird ($a = a_E(t; x)$), an dem sich zum aktuellen Zeitpunkt t das durch die Beziehung $X = X(t; x)$ identifizierte Volumenelement befindet. In der Regel gilt daher:

$$a_E(t; x) := a_L(t; X(t; x)) \quad \text{und somit} \quad a_L(t; X) = a_E(t; x(t; X)) \quad (5.1)$$

mit

$X(t; x)$ materielles Volumenelement am Ort x zum Zeitpunkt t in m (Ausgangsposition),

$x(t; X)$ Bahnkurve des materiellen Volumenelements X in m , Umkehrung von $X(t; x)$.

Im vorliegenden Bericht wird die *Lagrange*-Betrachtungsweise verwendet und daher weitestgehend auf die Indizes $_L$ und $_E$ verzichtet. Falls keine Vereinfachungen aufgrund der Geringfügigkeit der auftretenden Deformationen an den geomechanischen Prozessgleichungen vorgenommen werden, beziehen sich räumliche Ableitungen jedoch zumeist auf die Momentankonfiguration ($\nabla = \nabla_E$), und die abzuleitenden Prozessgrößen sind zu diesem Zweck in der *Euler*-Betrachtungsweise darzustellen. Zur Rücktransformation auf die *Lagrange*-Betrachtungsweise sind Ableitungsterme wie $(\nabla_E \cdot a_E)(t; x)$ dann gemäß Gleichung (5.1) zu interpretieren, d.h. in diesem Beispiel ist $(\nabla_E \cdot a_E)_L(t; X) = (\nabla_E \cdot a_E)(t; x(t; X))$. Räumliche Differentialoperatoren sind in diesem Bericht daher in der Regel wie vorstehend beschrieben zu verstehen und werden somit ebenfalls nicht mit Blick auf die Betrachtungsweise indiziert, im genannten Beispiel also $\nabla \cdot a$. Erfolgt eine räumliche Ableitung in der Ausgangskonfiguration (*Lagrange*-Betrachtungsweise), so wird dieser Sachverhalt explizit hervorgehoben.

Als Symbole für die räumliche Differentiation werden der Nabla-Operator ∇a (Gradient/transponierte *Jacobi*-Matrix) bzw. $\nabla \cdot a$ (Divergenz) und der *Laplace*-Operator Δa sowie für

den eindimensionalen Fall der Strich a' ; a'' verwendet. Zeitliche Ableitungen von Prozessgrößen werden in beiden Betrachtungsweisen durch einen Punkt \dot{a} gekennzeichnet, wobei auch hier in der Regel lediglich die *Lagrange*-Betrachtungsweise, d.h. die zeitliche Änderung der Größe eines bewegten materiellen Volumenelements (materielle Ableitung) verwendet wird. Für Prozessgrößen in der *Euler*-Betrachtungsweise ergibt sich die folgende Gleichung (5.2) für die materielle Ableitung des zum Zeitpunkt t am Punkt x befindlichen Volumenelements:

$$\begin{aligned}\dot{a}_L(t; X) &= \frac{D}{Dt} a_E(t; x(t; X)) \\ &= \left(\dot{a}_E + (\nabla_E a_E)^T \cdot v_E \right) (t; x(t; X))\end{aligned}\tag{5.2}$$

mit

v materielle Geschwindigkeit in m/s , $\dot{x}(t; X) = v_L(t; X) = v_E(t; x(t; X))$.

Größendifferenzen werden durch ein dem Bezeichner vorangestelltes Δ , Größeninkremente durch ein vorangestelltes d gekennzeichnet, wobei in diesem Bericht aus dem Kontext ersichtlich wird, ob das Zeichen Δ für den *Laplace*-Operator oder für einen Differenzbezeichner steht. Vereinzelt wird auch ein vorangestelltes ρ (großes griechisches Rho) als Analogon zu Δ für einen Quotienten verwendet. Des Weiteren bezeichnen stets $\frac{D}{Dt}$ die totale Zeitableitung einer Funktion in mehreren Veränderlichen, die ihrerseits zeitabhängig sind, T die Tensortransposition, I den 3×3 -Einheitstensor und Sp den Spur-Operator.

Schließlich sei noch darauf hingewiesen, dass in diesem Bericht generell abweichend zu *Itasca (2009)* die übliche geomechanische Vorzeichenkonvention verwendet wird, d.h. dass positive Zahlenwerte für Spannungen $\sigma_{tot}, \sigma_{eff}$ etc. Druckspannungen und für Verzerrungen $\varepsilon, \varepsilon_{vol}, \varepsilon^{m/th}$ etc. Stauchungen (Materialkompaktionen) bedeuten.

5.2 Ungekoppelte THM-Prozesse

5.2.1 Mechanischer Prozess

Die numerische Berechnung der Spannungen und Verzerrungen in einem geomechanischen Tragsystem erfolgt in FLAC^{3D} auf der Grundlage eines Stoffmodells und der in Gleichung (5.3) angegebenen *Cauchy*schen Bewegungsgleichung, *Itasca (2009)*, einer Form der Impulserhaltung, die die an einem Volumenelement angreifenden Volumen- und Oberflächenkräfte



mit der Massenträgheit des Elements ins Kräftegleichgewicht setzt. Als Volumenkraft liegt hierbei lediglich die Erdanziehungskraft vor, während an Oberflächenkräften die Spannungen, die von Nachbarelementen auf das Volumenelement ausgeübt werden, relevant sind. Es gilt:

$$\nabla \cdot \sigma_{tot} - \rho g = -\rho \dot{v} \quad (5.3)$$

mit

σ_{tot} Totalspannungstensor in MPa ,

ρ Dichte des Gebirgsmaterials in kg/m^3 ,

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

v materielle Geschwindigkeit in m/s .

Werden lediglich instantane mechanische Prozesse betrachtet, entfällt der Massenträgheitsterm und die rechte Seite wird zu 0 (Gleichgewichtszustand). Es sei noch darauf hingewiesen, dass die obige Wahl der Einheiten eine Einheitenumrechnung $Pa \rightarrow MPa$ bei den rechten beiden Termen erforderlich macht, die ihre absoluten Zahlenwerte mit dem Faktor 10^{-6} verringert.

Die totalen Spannungen teilen sich nach der *Biot*-Theorie in zwei Anteile auf, von denen einer über geomechanische Stoffmodelle auf das Korngerüst von Gebirge und mögliche Versatzmaterialien wirkt und mechanische Deformationen induziert (effektive Spannungen), während der andere Spannungsanteil auf die Fluide im Porenraum wirkt und deren Drücke erhöht. Die Gleichungen, die diese beiden Effekte quantifizieren, sind bei den H \leftrightarrow M-Kopplungsbeziehungen in Abschnitt 5.3 zu finden (Gleichungen (5.39) und (5.40)). Für das zu verwendende geomechanische Stoffmodell, das die Effektivspannungsänderungen mit den Änderungen der mechanischen Verzerrungen verknüpft, stehen unter *FLAC^{3D}* mehrere Optionen zur Verfügung. Da bei den üblichen Definitionen für Verzerrungs(raten)tensoren lediglich Streckungen/Stauchungen und Scherverformungen berücksichtigt und die Rotationsanteile aus den Deformationen herausgefiltert werden, ist hier auch ein „mitrotierender Spannungsratentensor“ ζ_{eff}^{-1} („co-rotational stress-rate tensor“, *Itasca, 2009*) einzusetzen, der die Spannungen aus dem Blickwinkel des durch den Deformationsprozess gedrehten Volumenelements erfasst. Der Übergang zwischen den mitrotierten und den üblichen Spannungen in den kartesischen Koordinaten des Modells erfolgt durch einen additiven Korrektortensor ζ_{corr} mithilfe von Winkelgeschwindigkeiten gemäß *Itasca (2009)* und wird in Gleichung (5.4) wiedergegeben:



$$\dot{\sigma}_{eff} = \zeta_{eff}^{\perp} + \zeta_{corr} \quad (5.4)$$

mit

σ_{eff} Effektivspannungstensor in *MPa* (bei nur mechanischer Betrachtung ist $\sigma_{eff} = \sigma_{tot}$),

ζ_{eff}^{\perp} mitrotierender Effektivspannungsratentensor in *MPa/s*,

ζ_{corr} Korrekturtensor zur Transformation von ζ_{eff}^{\perp} ins Modellkoordinatensystem in *MPa/s*.

Gleichung (5.5a) zeigt eine allgemeine Formulierung von geomechanischen Stoffmodellen, wobei als einfachstes Stoffmodell für zeitunabhängige Deformationsvorgänge das in Gleichung (5.5b) aufgezeigte isotrope linear-elastische Stoffmodell von *Hooke* gilt:

$$\zeta_{eff}^{\perp} = f(\dot{\varepsilon}^m; \sigma_{tot}; \dots) \quad (5.5a)$$

$$\zeta_{eff}^{\perp} = 2\mu \cdot \dot{\varepsilon}^m + \lambda \text{Sp} \dot{\varepsilon}^m \cdot I \quad \text{mit} \quad \lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad \text{und} \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (5.5b)$$

mit

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

ε^m Verzerrungstensor, dimensionslos,

... ggf. weitere Eingangsdaten für die Stoffmodellfunktion,

$\lambda; \mu$ Lamé-Konstanten in *MPa*,

E Elastizitätsmodul oder *Youngscher* Modul in *MPa*,

ν *Poissonzahl*, dimensionslos.

Sowohl die Spannungstensoren wie auch der Verzerrungstensor sind symmetrisch. Die Notation mit dem hochgestellten m für die hier eingeführten mechanisch induzierten Verzerrungen ε^m wird gewählt, weil neben ihnen auch thermisch induzierte Verzerrungen ε^{th} existieren, die in Abschnitt 5.3 eingeführt werden. Der Bezeichner ε ohne Index schließt beide Verzerrungsarten ein.

Verzerrungstensoren können auf verschiedene Art und Weise aus dem Deformationsgradienten $\nabla x = \nabla_L x(t; X)$ oder dem Verschiebungsgradienten $\nabla u = \nabla_L u(t; X)$, welche beide in der Ausgangskonfiguration gebildet worden sind, erhalten werden, wobei die Verschiebung eines Volumenelements über $u(t; X) := x(t; X) - X$ definiert wird. Technische Verzerrungen setzen dabei die insgesamt aufsummierten Verschiebungen am Ende des Deformationsprozesses zu

den Modellabmessungen in der Ausgangskonfiguration in Bezug, während die wahren, logarithmischen oder *Hencky*-Verzerrungen sukzessive infinitesimale Deformationsinkremente zu momentanen Abmessungen des bereits deformierten Modells ins Verhältnis setzen und aufsummieren und somit den kontinuierlich ablaufenden Deformationsprozess berücksichtigen. Eine Definition des logarithmischen *Hencky*-Verzerrungstensors erfolgt in Gleichung (5.6a) über den Strecktensor aus der Polarzerlegung des Deformationsgradienten (Zerlegung in ein Produkt aus Streck- und Rotationstensor), und eine Definition des mit der technischen Verzerrung verbundenen linearisierten Verzerrungstensors erfolgt in Gleichung (5.6b) über den symmetrischen Anteil des Verschiebungsgradienten (Zerlegung in eine Summe aus Streck- und Rotationstensor):

$$\varepsilon_{log}^m = -\ln(S_{log}) \quad (5.6a)$$

$$\varepsilon_{lin}^m = -S_{lin} = -\frac{1}{2}(\nabla u + (\nabla u)^T) \quad \Rightarrow \quad \dot{\varepsilon}_{lin}^m = -\frac{1}{2}(\nabla v + (\nabla v)^T) \quad (5.6b)$$

mit

ε_{log}^m logarithmischer *Hencky*-Verzerrungstensor, dimensionslos,

S_{log} Strecktensor des *Lagrange*-Deformationsgradienten, dimensionslos,

$\nabla x = S_{log} \cdot R_{log}$ mit S_{log} symmetrisch positiv definit und R_{log} orthogonale Drehmatrix,

ε_{lin}^m linearisierter Verzerrungstensor, dimensionslos,

S_{lin} symmetrischer Anteil des *Lagrange*-Verschiebungsgradienten, dimensionslos,

$\nabla u = S_{lin} + R_{lin}$ mit S_{lin} symmetrisch und R_{lin} antisymmetrisch,

u materielle Verschiebung in m .

Der Zusammenhang zwischen einem Volumenelement, seiner Bahnkurve, seiner materiellen Verschiebung und seiner materiellen Geschwindigkeit ergibt sich dabei zu $u = x - X$, woraus nach materieller Ableitung $\dot{u} = \dot{x} = v$ und nach räumlicher Ableitung in der Ausgangskonfiguration $\nabla u = \nabla x - I$ (eindimensional: $u' = x' - 1$) folgen.

Im eindimensionalen Raum findet keine Rotation statt ($R_{log} = 1$ und $R_{lin} = 0$), so dass sich die Verzerrungen zu $\varepsilon_{log}^m = -\ln(x')$ bzw. $\varepsilon_{lin}^m = -u'$ ergeben. Wird die Deformation lokal als gleichförmig angenommen, können die Ableitungsterme näherungsweise durch die Differenzenquotienten $\Delta x / \Delta X$ bzw. $\Delta u / \Delta X$ ersetzt werden. Für das Linienelement ΔX im Aus-



gangsmodell beschreibt Δx dann die Länge des Elements im deformierten Modell und $\Delta u = \Delta x - \Delta X$ seine Längenänderung aufgrund des Deformationsprozesses. Die sich auf diese Weise ergebenden Ausdrücke für $\varepsilon_{log}^m \approx -\ln(\Delta x/\Delta X)$ und $\varepsilon_{lin}^m \approx -\Delta u/\Delta X$ sind somit die bekannten Formeln für die wahre bzw. die technische Verzerrung bezüglich des betrachteten Linienelements.

Volumenverzerrungen lassen sich ebenfalls in einer logarithmischen (wahren) und in einer linearisierten Form gemäß Gleichung (5.7a/b) definieren. In Analogie zur approximativen eindimensionalen Formulierung von $\varepsilon_{log}^m \approx -\ln(\Delta x/\Delta X) = -\ln(l_{def}/l_0)$ in Termen von sich verändernden Längen eines Linienelements lässt sich dabei auch die wahre Volumenverzerrung näherungsweise in Termen von sich verändernden Volumina eines Volumenelements ausdrücken:

$$\varepsilon_{log,vol}^m = \text{Sp } \varepsilon_{log}^m = -\ln(\det \nabla x) \approx -\ln(V_{def}/V_0) \quad (5.7a)$$

$$\varepsilon_{lin,vol}^m = \text{Sp } \varepsilon_{lin}^m = -\nabla \cdot u \quad (5.7b)$$

mit

$\varepsilon_{log,vol}^m$ logarithmische Volumenverzerrung, dimensionslos,

V_{def} Volumen des Volumenelements nach der Deformation in m^3 ,

V_0 Volumen des Volumenelements vor der Deformation in m^3 ,

$\varepsilon_{lin,vol}^m$ linearisierte Volumenverzerrung, dimensionslos.

Im eindimensionalen Raum stimmen die wahren und die linearisierten Verzerrungen mit den entsprechenden Volumenverzerrungen überein, d.h. es gilt $\varepsilon_{log,vol}^m = \varepsilon_{log}^m = -\ln(x')$ und $\varepsilon_{lin,vol}^m = \varepsilon_{lin}^m = -u'$.

Im Rahmen der mechanischen Ausbalancierung der Spannungen und Deformationen im Berechnungsmodell verwendet FLAC^{3D} die linearisierten Definitionen für den Verzerrungstensor ε^m und die daraus berechnete Volumenverzerrung ε_{vol}^m für jeden Iterationsschritt. Wird allerdings im Modus für große Deformationen gerechnet, werden in jedem Schritt die Abmessungen der im bisherigen Verlauf der Simulation bereits deformierten Modellzonen als Bezugsgrößen für die Verzerrungsberechnung eingesetzt. Insgesamt summieren sich die inkrementellen Verzerrungen numerisch also näherungsweise zu einer logarithmischen Gesamtver-



zerrung auf. In der Implementierung der M→H-Kopplung im FTK-Simulator nach Gleichung (5.43) im Abschnitt 5.3 ist bereits auch für die Volumenverzerrungssinkremente in jeder Zone des Berechnungsmodells der logarithmische, reversible Ansatz über die Volumenveränderungen aus dem letzten Term der Gleichung (5.7a) gewählt worden. Insgesamt ist es also sinnvoll, in der weiteren formelmäßigen Behandlung der Prozesse im vorliegenden Bericht die logarithmischen Verzerrungen $\varepsilon^m = \varepsilon_{log}^m$ und $\varepsilon_{vol}^m = \varepsilon_{log;vol}^m$ zu verwenden.

5.2.2 Thermischer Prozess

Wärmeübertragung kann auf drei unterschiedliche Weisen erfolgen:

- (1) Wärmeleitung (Konduktion/Diffusion),
- (2) Wärmeströmung (Konvektion),
- (3) Wärmestrahlung (gelegentlich auch als „Radiation“ bezeichnet).

Alle drei Wärmetransportarten sind in TOUGH2 implementiert, wobei der Konvektionsprozess bei einer Simulation der Wärmeausbreitung stets aktiv ist, während die anderen beiden Prozesse abstellbar sind. Wärmestrahlungsprozesse sind im Rahmen dieses Forschungsvorhabens nicht berücksichtigt worden.

Die zur Wärmeübertragung gehörende Bilanzgröße ist die innere Energie, welche sich in einem geschlossenen System lediglich durch die Wärmeübertragung entsprechend (1) und ggf. (3) und durch verrichtete Arbeit ändern kann. In einem aufgrund von hydraulischen Strömungsprozessen offenen System sind zusätzlich die Konvektionsprozesse nach (2) zu berücksichtigen. Mechanische Arbeit wird hingegen im thermohydraulischen (Teil-)System nicht verrichtet und entsprechend findet auch keine Energieumwandlung Wärme↔Arbeit statt, so dass die zeitliche Änderung der inneren Energie mit der zeitlichen Änderung der Wärmeenergie gleichgesetzt werden kann. Insgesamt lässt sich somit die Wärmeenergiebilanz für ein Volumenelement in einem porösen Medium mit den Gleichungen (5.8a) bis (5.8c) formulieren:



$$-\nabla \cdot q_E + \hat{q}_E = \dot{\zeta}_{E/V} = \dot{\zeta}_{U/V} \quad (5.8a)$$

$$\zeta_{U/V} = (1 - \phi) \rho_s u_s + \phi \sum_{\varphi} S_{\varphi} \rho_{\varphi} u_{\varphi} \quad (5.8b)$$

$$\dot{u}_s = \dot{\zeta}_{E/m;s} = c_s \dot{T} \quad (5.8c)$$

mit

q_E Wärmeenergiestromdichte in J/m^2s (beinhaltet konvektive und konduktive Anteile),

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

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

$\zeta_{U/V}$ innere Energie pro m^3 Medium in J/m^3 ,

ϕ Porosität des Mediums, dimensionslos,

S_{φ} Sättigung, dimensionslos (m^3/m^3),

ρ_{φ} Massendichte in kg/m^3 ,

u_{φ} spezifische innere Energie in J/kg ,

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

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

T Temperatur in K oder $^{\circ}C$.

Der Index $\varphi \in \{l; g\}$ bezeichnet hier die fluide Phase (l : Flüssigphase, g : Gasphase) gemäß der Zweiphasenflussformulierungen der hydraulischen Prozessgleichungen (siehe Abschnitt 5.2.3.1), wobei er im Zusammenhang mit den Größen ρ_{φ} und u_{φ} auch den Wert $\varphi = s$ für die Festphase, d.h. für das Korngerüst, annehmen darf. Der thermische Quellterm \hat{q}_E ist positiv im Fall einer Wärmeenergiequelle und negativ im Fall einer Wärmeenergiesenke. Dabei wird in diesem Bericht der Begriff „Quellen“ übergeordnet für Quellen und Senken verwendet, falls nicht explizit zwischen den beiden Termini differenziert wird.

Die Wärmeübertragung mittels der betrachteten Transportarten Konvektion und Konduktion findet über das hydraulische Strömungsfeld bzw. nach dem Gesetz von *Fourier* statt:



$$q_E = q_E^{conv} + q_E^{cond} \quad \text{mit} \quad q_E^{conv} = \sum_{\varphi} \left(h_{\varphi} \sum_{\kappa} q_{m;\kappa\varphi} \right) \quad \text{und} \quad q_E^{cond} = -\lambda \nabla T \quad (5.9)$$

mit

q_E^{conv} Wärmeenergiestromdichte durch Konvektion in J/m^2s ,

q_E^{cond} Wärmeenergiestromdichte durch Konduktion in J/m^2s ,

h_{φ} spezifische Enthalpie in J/kg ,

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

λ Wärmeleitfähigkeit in $W/(m \cdot K)$.

5.2.3 Hydraulischer Prozess

5.2.3.1 Bilanzgleichungen, Transportgleichungen und Nebenbedingungen

Die grundlegenden Gleichungen zur Beschreibung von advektiven hydraulischen Strömungsprozessen in einem Endlagersystem sind die *Darcy*-Gleichung für den Fluidtransport in Verbindung mit einer Bilanzgleichung für die Erhaltung der beteiligten Stoffmengen. Im Fall mehrerer Fluide (Flüssigkeit und Gas; „Phasen“) und darin enthaltener Stoffe (Wasser und Luft bzw. Wasserstoff; „Komponenten“) sind entsprechend mehrere Instanzen dieser Gleichungen aufzustellen. Sowohl in FLAC^{3D} wie auch in TOUGH2 werden die genannten Gleichungen verwendet, jedoch unterscheiden sie sich hinsichtlich ihrer „Erhaltungsgrößen“: Während in FLAC^{3D} die Wassermengen entsprechend der originären Form der Darcy-Gleichung über ihre Volumina erfasst werden, die aufgrund von endlagersystembedingt auftretenden Änderungen von Druck und Temperatur eigentlich nicht erhalten bleiben, berücksichtigt das Programm TOUGH2 die unter den vorherrschenden thermohydraulischen Bedingungen geltenden Massendichten der fluiden Phasen sowie die dort vorliegenden Massenanteile einer jeden Komponente und verwendet somit die Stoffmassen als Erhaltungsgrößen, *Itasca (2009)* bzw. *Rutqvist et al. (2002)*. Etwaige kernphysikalische oder chemische Effekte, bei denen Teile der Massen in Energie umgewandelt werden, sind hierbei nicht von Bedeutung, so dass es sich hier bei den Stoffmassen tatsächlich um Erhaltungsgrößen handelt. Des Weiteren sind im Rahmen dieses Forschungsvorhabens auch noch keine diffusiven Transportprozesse berücksichtigt worden, da im Rahmen der Entwicklung des FTK-Simulators zunächst nur Simulationszeiträume betrachtet worden sind, in denen sich der thermodynamische Zustand im



numerischen Test- bzw. Benchmarkmodell noch signifikant geändert hat und die advektiven Strömungsprozesse daher überwogen haben. TOUGH2 unterstützt die Simulation von molekularen Diffusionsprozessen im Rahmen des Zweiphasenflusses, so dass diese Funktionalität bei Bedarf relativ einfach in den FTK-Simulator nachimplementiert werden kann.

In den beiden Programmen werden die Fluidbilanzgleichungen gemäß den Gleichungen (5.10) und (5.11) ausgedrückt. Darin stehen die Indizes $\kappa \in \{w; a\}$ für die Komponente (w : Wasser, a : Luft/H₂) und $\varphi \in \{l; g\}$ für das Fluid (l : Flüssigphase, g : Gasphase), wobei sich die Formulierungen aus FLAC^{3D} im Gegensatz zu den Zweiphasenflussformulierungen aus TOUGH2 nur auf eine Flüssigphase mit Wasser beziehen:

$$\text{TOUGH2:} \quad -\sum_{\varphi} \nabla \cdot q_{m;\kappa\varphi} + \hat{q}_{m;\kappa} = \dot{\zeta}_{m/V;\kappa} \quad (5.10)$$

$$\text{FLAC}^{3D}: \quad -\nabla \cdot q_{V;l} + \hat{q}_{V;l} = \dot{\zeta}_{V/V;l} \quad (5.11)$$

mit

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

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

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

$q_{V;\varphi}$ Volumenstromdichte (Filtergeschwindigkeit) in m/s ($= m^3/m^2s$),

$\hat{q}_{V;\varphi}$ volumetrische Quellstärke in $1/s$ ($= m^3/m^3s$),

$\zeta_{V/V;\varphi}$ akkumuliertes Volumen des zugeströmten Fluids pro m^3 Medium, dimensionslos (m^3/m^3).

Alle genannten Größen beziehen sich dabei auf Durchflussflächen ($/m^2$) bzw. Elementvolumina ($/m^3$) des gesamten Mediums, d.h. inklusive des Korngerüsts, während die drei Größen $q_{V;\varphi}$, $\hat{q}_{V;\varphi}$ und $\zeta_{V/V;\varphi}$ lediglich Wasservolumina ($m^3/$) in Bezug setzen. Auch hier gilt für die Quellen, dass negative Zahlenwerte für $\hat{q}_{m;\kappa}$ und $\hat{q}_{V;\varphi}$ Senken bezeichnen und dass terminologisch nicht zwischen Quellen und Senken unterschieden wird, falls nicht explizit „Quellen“ und „Senken“ erwähnt werden.



Die Gleichungen (5.12) und (5.13) geben die *Darcy*-Gleichung in den von TOUGH2 bzw. FLAC^{3D} verwendeten Fassungen, die jeweils den Porendruckgradienten ∇p_φ anstelle des hydraulischen Gradienten ∇h_φ verwenden, wieder:

$$\text{TOUGH2: } q_{m;\kappa\varphi} = -\rho_\varphi X_{\kappa\varphi} \cdot K_{rel;\varphi}(S_l) \cdot \frac{K}{\eta_\varphi} \cdot \nabla(p_\varphi + \gamma_\varphi z) \quad (5.12)$$

$$\text{FLAC}^{3D}: \quad q_{V;l} = -K_{rel;l}(S_l) \cdot k_l \cdot \nabla(p_l + \gamma_l z) \quad (5.13)$$

mit

ρ_φ Massendichte in kg/m^3 ,

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

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

S_φ Sättigung, dimensionslos (m^3/m^3),

K intrinsische Permeabilität in m^2 (bei hydraulischer Anisotropie tensoriell),

η_φ dynamische Viskosität in $MPa \cdot s$,

k_φ Mobilität in $m^2/(MPa \cdot s)$ (bei hydraulischer Anisotropie tensoriell), $k_\varphi = K/\eta_\varphi$,

p_φ Porendruck in MPa ,

γ_φ Wichte in $MN/m^3 = MPa/m$,

z vertikale Koordinate (negativer Teufenwert) in m .

Für die Sättigungen S_φ und die Massenanteile $X_{\kappa\varphi}$ gelten dabei die Beziehungen

$$\sum_{\varphi} S_\varphi = 1 = \sum_{\kappa} X_{\kappa\varphi} \quad (5.14)$$

In verschiedenen Literaturquellen wird anstelle von oder zusätzlich zu Fluiddrücken auch die Druckhöhe $h_\varphi = p_\varphi/\gamma_\varphi$ der entsprechenden Fluide verwendet, wobei γ_φ die jeweilige Fluidwichte darstellt. Die Verwendung der Druckhöhe wird im vorliegenden Text soweit möglich vermieden.

In FLAC^{3D} ist die Modellierung eines hydraulisch anisotropen Mediums möglich und die Mobilität k_φ wird dort somit als tensorielle Größe eingeführt. In TOUGH2 besteht die Möglichkeit der Berücksichtigung einer hydraulischen Anisotropie über die Angabe von drei Zah-

lenwerten $K_1; K_2; K_3$ für die Permeabilität eines Materials bzw. eines Materialbereiches. Jeder einzelnen Zonenverbindung der Modelldiskretisierung wird dann einer dieser drei Zahlenwerte als Permeabilität K zugewiesen. Die Permeabilität K ist in TOUGH2 also eine (diskretisierungsbedingt variierende) skalare Größe. Eine hydraulisch anisotrope Modellierung ist in TOUGH2 damit nur in sehr beschränkter Weise möglich.

Die Permeabilität eines porösen Mediums lässt sich multiplikativ aufteilen in einen nur von den Eigenschaften des porösen Mediums bestimmten Anteil, der intrinsischen Permeabilität K , sowie einen vom Füllstand des Porenraumes abhängigen Anteil, der relativen Permeabilität $K_{rel;\varphi}(S_l)$. Je geringer der Porenraumanteil ist, der von dem Fluid φ ausgefüllt wird, umso beschränkter sind die Pfade, die ein Teilchen des Fluides zur Durchströmung des Porenraumes nutzen kann, d.h. umso geringer ist die Permeabilität im Verhältnis zum Maximalwert K , der bei voller Sättigung des Porenraumes mit dem Fluid φ erreicht wäre. Mit dem Programm FLAC^{3D} sind zwar nur hydraulische Simulationen des Einphasenflusses Wasser möglich, jedoch können bei Erreichen eines Porenwasserdruckes von 0 MPa auch teilgesättigte Modellbereiche entstehen, in denen die Mobilität (oder äquivalent Permeabilität) dann über den Faktor $K_{rel;l}(S_l)$ herabgesenkt wird. FLAC^{3D} verwendet für $K_{rel;l}(S_l)$ die fixe, parameterfreie Funktion

$$K_{rel;l}(S_l) = S_l^2(3 - 2S_l) , \quad (5.15)$$

das kubische Polynom, das durch die Randbedingungen $K_{rel;l}(S_l) = S_l$ und $K'_{rel;l}(S_l) = 0$ für $S_l \in \{0;1\}$ eindeutig bestimmt ist. In TOUGH2 hingegen ist die Wahl verschiedener parameterabhängiger Funktionen für $K_{rel;\varphi}(S_l)$ möglich; darüber hinaus können weitere benutzerdefinierte Funktionen für die Relativpermeabilität in den *Fortran*-Quellcode des Simulators nachimplementiert werden. Detaillierte Erläuterungen zu relativen Permeabilitäten sowie die klassischen Ansätze nach *Burdine* und *Mualem* sind in Abschnitt 5.2.3.2 zu finden.

Im Fall des Zweiphasenflusses sind die Porendrucke der unterschiedlichen Phasen noch durch die ebenfalls sättigungsabhängig (und selten auch temperaturabhängig) formulierte Kapillardruckbeziehung aneinander gekoppelt:



$$p_g = p_l + p_{cap}(S_l) \quad (5.16)$$

mit

p_{cap} Kapillardruck in MPa , Konvention hier: $p_{cap} \geq 0 MPa$.

In TOUGH2 werden wiederum diverse parameterabhängige Funktionen für $p_{cap}(S_l)$ zur Verfügung gestellt mit der Option zur Nachimplementierung weiterer, während der Kapillardruck in FLAC^{3D} vernachlässigt wird. Detaillierte Erläuterungen zu Kapillardrücken sowie die klassischen Ansätze nach *Brooks/Corey* und *van Genuchten* sind in Abschnitt 5.2.3.2 zu finden.

Zur vollständigen Beschreibung der hydraulischen Strömungsprozesse in FLAC^{3D} und in TOUGH2 sind noch die Gleichungen erforderlich, die die Fluidmengenänderungsterme $\dot{\zeta}_{m/V;\kappa}$ bzw. $\dot{\zeta}_{V/V;l}$ pro m^3 Medium aus Gleichung (5.10/5.11) näher definieren und zu den anderen Zustandsgrößen in Beziehung setzen. Dazu werden bei Vorliegen eines zweiphasigen Zustandes (Zweiphasenfluss in TOUGH2 oder Teilsättigung in FLAC^{3D}) die Fluidmengen selbst über die Sättigung und ggf. über die poren- und temperaturabhängigen Massendichten der beiden Phasen berechnet, während bei Vollsättigung in der volumenbezogenen Einphasenformulierung von FLAC^{3D} der Kompressionsmodul bzw. bei Anwendung der *Biot*-Theorie der *Biot*-Modul die grundlegende Verbindung zwischen den Wasserzuflussvolumina im Porenraum und den Porenwasserdruckanstiegen darstellt. Die Gleichungen (5.17) und (5.18) fassen die in TOUGH2 und FLAC^{3D} verwendeten Beziehungen zusammen:

$$\text{TOUGH2: } \dot{\zeta}_{m/V;\kappa} = \phi \sum_{\varphi} S_{\varphi} \rho_{\varphi} X_{\kappa\varphi} \quad (5.17)$$

$$\text{FLAC}^{3D}: \quad \dot{\zeta}_{V/V;l} = \frac{S_l}{\tilde{M}_l} \dot{p}_l + \phi \dot{S}_l \quad \text{mit} \quad \tilde{M}_l = \frac{\tilde{K}_l}{\phi + (\alpha - \phi) \cdot (1 - \alpha) \cdot \tilde{K}_l / \tilde{K}} \quad (5.18)$$

mit

ϕ Porosität des Mediums, dimensionslos,

\tilde{M}_{φ} *Biot*-Modul in MPa ,

\tilde{K}_{φ} Kompressionsmodul in MPa ,

α *Biot*-Koeffizient, dimensionslos,

\tilde{K} drainierter Kompressionsmodul des porösen Mediums in MPa .

Die *Biot*-Theorie berücksichtigt die unterschiedlichen Kompressibilitäten von Korngerüst und Fluid. Mit der u.a. für nicht mechanisch gekoppelte hydraulische Modellierungsansätze geeigneten Wahl von $\alpha = 1$ ($\Rightarrow \check{M}_l = \check{K}_l / \phi$) wird dabei ein Gesteinsmaterial beschrieben, dessen Korngerüst als inkompressibel angesetzt wird.

Gleichung (5.18) vereinfacht sich für einen zweiphasigen Zustand ($\dot{p}_l = 0 \frac{MPa}{s}$) zu dem Volumen-Analogon von Gleichung (5.17) und für einen vollgesättigten Zustand mit $\alpha = 1$ zur oben erwähnten Beziehung zwischen Wasserzuflussvolumen und Porenwasserdruckanstieg, $\dot{p}_l = \check{K}_l \cdot \dot{\zeta}_{V/V,l} / \phi$. Eine Erweiterung von Gleichung (5.18) um mechanische und thermische Terme wird in FLAC^{3D} überdies als zentraler TM→H-Kopplungsansatz verwendet, siehe dazu Abschnitt 5.3.

TOUGH2 bietet über das Modul EOS9 auch eine Möglichkeit, Einphasenflussberechnungen durchzuführen, was aufgrund der Ähnlichkeit zur Strömungsberechnungsmethode in FLAC^{3D} ein erster Ansatzpunkt für die Entwicklung des FTK-Simulators gewesen ist. Wie in FLAC^{3D} werden in TOUGH2-EOS9 nur eine Strömungs- und nur eine Fluidbilanzgleichung für die zu 100% aus Wasser bestehende Flüssigphase verwendet, Wasserdampf und gelöste Luft werden vernachlässigt. Für die Gasphase wird ein im gesamten Modell stets geltender Referenzdruck $p_g \equiv p_{g,ref}$ angesetzt, d.h. sie wird als unendlich permeabel angenommen (auch bei Vollsättigung), so dass die bei realistischer Betrachtung des zu simulierenden Szenarios auftretenden Porengasdruckänderungen sofort ausgeglichen würden. Die TOUGH2-EOS9 zugrundeliegende Gleichung ist eine leichte Verallgemeinerung der *Richards*-Gleichung, die erhalten wird, wenn die auf $\phi = 1$ und $\kappa = w$ eingeschränkten Gleichungen (5.10), (5.12) und (5.17) ineinander eingesetzt werden:

$$\frac{d}{dt}(\phi S_l \rho_l) = \nabla \cdot \left(\rho_l \cdot K_{rel,l}(S_l) \cdot \frac{K}{\eta_l} \cdot \nabla(p_l + \gamma_l z) \right) + \hat{q}_{m,w} \quad (5.19)$$

Bei TOUGH2-EOS9 ist der Porenwasserdruck im Zustand der Teilsättigung jedoch nicht konstant gleich dem Referenzdruck der Gasphase (FLAC^{3D}: $p_l \equiv p_{g,ref} := 0 MPa$), sondern wird wie im zweiphasigen Zustand durch den sättigungsabhängigen Kapillardruck gemäß Gleichung (5.16) bestimmt.



5.2.3.2 Relativpermeabilitäten und Kapillardrucke

Bei der Simulation von Strömungsprozessen in einem porösen Medium mithilfe des Zweiphasenflusses treten durch die Aufteilung des Porenraumes auf eine benetzende und eine nichtbenetzende Phase zusätzliche Effekte gegenüber der Simulation eines Einphasenflusses auf, welche die Strömungseigenschaften der beiden Phasen und damit die Eigenschaften des gesamten Modells beeinflussen können. Hierbei führt ein verminderter Sättigungsgrad einer Phase am Porenraum zu einer verminderten Beweglichkeit dieser Phase (die effektive Permeabilität des porösen Mediums hinsichtlich dieser Phase sinkt ab im Vergleich zu einer Vollsättigung des Porenraumes mit dieser Phase), und die sich in den engen Porenräumen ausbildende Oberflächenspannung der benetzenden Phase führt zur Ausbildung unterschiedlicher Drücke in den beiden Phasen (Ausbildung eines Kapillardruckes, der von den Fluiddrücken ausgeglichen werden muss). In beiden Fällen werden Eingangsgrößen der *Darcy*-Gleichungen beider Phasen verändert und somit veränderte Massenströme erhalten.

Sowohl die relativen Permeabilitäten der beiden Phasen – d.h. ihre effektiven Permeabilitäten im Verhältnis zur absoluten Permeabilität des porösen Mediums – wie auch der Kapillardruck hängen wesentlich von den Sättigungen der beiden Phasen ab. Zur Beschreibung dieser drei Größen in Abhängigkeit von den Sättigungen wurden in der Vergangenheit bereits mithilfe von diversen laborativen Untersuchungen und mathematischen Überlegungen verschiedene Modelle entwickelt und validiert, von denen die wichtigsten im Folgenden vorgestellt werden. Die benetzende Phase bzw. das benetzende Fluid wird hierbei als Flüssigphase bzw. Flüssigkeit bezeichnet werden, die bzw. das nichtbenetzende als Gasphase bzw. Gas. Bei den Komponenten, aus denen die beiden Phasen aufgebaut sind, handelt es sich vorrangig um Wasser (flüssig / als Dampf in der Gasphase) und Wasserstoff (gasförmig / in der Flüssigphase gelöst).

(a) *Vorbemerkungen zu den hydraulischen Größen*

In den referenzierten Literaturquellen *Luckner et al. (1989)*, *Parker et al. (1987)*, *van Genuchten (1980)*, *Mualem (1976)*, *Brooks & Corey (1964)* und *Corey (1954)* sind die Bezeichner der hydraulischen Größen zwar weitestgehend ähnlich, jedoch nicht vollständig identisch und teilweise auch mit Zahlenwerten vorbelegt. Daher wird hier ein an die Literatur angelehnter, konglomerierter Variablensatz verwendet, der allen referenzierten Variablensätzen Genüge trägt.



Die Sättigungen der Flüssigphase S_l und der Gasphase S_g werden wie üblich über die Volumenanteile des entsprechenden Fluids am Porenraum, dimensionslos oder in % ($=1/100$), definiert. Im Falle des Zweiphasenflusses sind diese beiden Größen über die Beziehung $S_g = 1 - S_l$ ineinander überführbar, so dass alle sättigungsabhängigen Beziehungen über eine vorab festgelegte der beiden Größen definiert werden können. Verwendet wird in der Literatur oft die Flüssigkeitssättigung S_l . In dem vorliegenden Text werden Gleichungen, die sich auf die Gasphase beziehen, aber auch in der Gassättigung angegeben, und zur Klarifikation wird dann in der Regel auch von Flüssigkeits- bzw. Gassättigung gesprochen; ist nur von einer nicht näher bestimmten „Sättigung“ die Rede, ist die Flüssigkeitssättigung gemeint.

In der Regel lässt sich eine Phase aus dem porösen Medium nicht vollständig durch das Durchströmen der anderen Phase *verdrängen* (für ein Simulationsbeispiel zur *Verdunstung* der Flüssigphase im Medium durch Durchströmung mit *trockener* Luft siehe Beispiel (3) in Abschnitt 6.3.3). Die durchgängige Gasphase degeneriert bei zu geringer Gassättigung zu separaten, unverbundenen Gasblasen, und die Flüssigphase schrumpft bei zu geringer Flüssigkeitssättigung zu einem dünnen Film zusammen, der hinreichend stark an der Oberfläche des Korngerüsts haftet, so dass der hydraulische Gradient keinen Materiefluss in dieser Phase mehr verursacht, *Luckner et al. (1989)*. Die Fluidsättigungen bewegen sich somit effektiv in Teilbereichen $[S_{lr}; S_{ls}]$ bzw. $[S_{gr}; S_{gs}]$ von $[0;1]$. Für jede Phase $\varphi \in \{l; g\}$ bezeichnet hier $S_{\varphi r}$ die Restsättigung („residual“), die durch Zustrom der jeweils anderen Phase nicht unterschritten werden kann, und $S_{\varphi s}$ die Maximalsättigung („saturated“), die durch Zustrom derselben Phase nicht überschritten werden kann. Dabei fallen die Bereichsgrenzen mit $S_{lr} = 1 - S_{gs}$ und $S_{ls} = 1 - S_{gr} (=1)$ in den referenzierten Quellen, welche auch Gleichungen für die Gasphase führen, paarweise zusammen.

Für die Formulierung der Beziehungen zwischen Fluidsättigung und Relativpermeabilität bzw. Kapillardruck wird für gewöhnlich zunächst eine effektive Fluidsättigung eingeführt, die den entsprechenden Teilbereich $[S_{\varphi r}; S_{\varphi s}]$ auf das Intervall $[0;1]$ zurücknormiert:



$$S_{\varphi,eff} := \frac{S_{\varphi} - S_{\varphi r}}{S_{\varphi s} - S_{\varphi r}} \quad (\varphi \in \{l, g\}) \quad (5.20a)$$

$$\Rightarrow S_{l,eff} = \frac{S_l - S_{lr}}{S_{ls} - S_{lr}} ; \quad S_{g,eff} = \frac{S_g - S_{gr}}{S_{gs} - S_{gr}} = \frac{S_{ls} - S_l}{S_{ls} - S_{lr}} = 1 - S_{l,eff} \quad (5.20b)$$

mit

$S_{\varphi,eff}$ effektive Sättigung der Phase φ , dimensionslos,

S_{φ} (absolute) Sättigung der Phase φ , dimensionslos,

$S_{\varphi r}$ Restsättigung der Phase φ , dimensionslos,

$S_{\varphi s}$ Maximalsättigung der Phase φ , dimensionslos.

Gleichung (5.20b) zeigt hierbei insbesondere, dass auch alle effektivsättigungsabhängigen Beziehungen auf einfache Weise über eine vorab festgelegte Effektivsättigung, z.B. $S_{l,eff}$, definiert werden können. Üblicherweise wird auch der Kapillardruck $p_{cap}(S_{l,eff})$ in Abhängigkeit der effektiven Flüssigkeitssättigung angegeben, so auch in diesem Abschnitt 5.2.3.2.

Im Ausgangszustand können Gebirgsbereiche oder Geomaterialien auch Absolut sättigungswerte S_{φ} außerhalb von $[S_{\varphi r}; S_{\varphi s}]$ (d.h. $0\% \leq S_{\varphi} < S_{\varphi r}$ oder $S_{\varphi s} < S_{\varphi} \leq 100\%$) und damit rechnerisch nach den Gleichungen (5.20a,b) Effektivsättigungswerte $S_{\varphi,eff}$ außerhalb von $[0;1]$ besitzen. Dies wäre beispielsweise bei einem unverritzten Gebirgsbereich mit einer angenommenen primären Flüssigkeitsvollsättigung oder bei einem Versatzmaterial mit einer primären Flüssigkeitssättigung unterhalb des residualen Zahlenwertes der Fall. Um derartige, unintuitive Zahlenwerte $S_{\varphi,eff} < 0\%$ oder $S_{\varphi,eff} > 100\%$ zu vermeiden (die überdies auch unintuitive relative Permeabilitäten von $K_{rel;\varphi} < 0\%$ bzw. $K_{rel;\varphi} > 100\%$ oder gar komplexe Zahlenwerte zur Folge hätten, siehe Unterabschnitt (c)), können die Zahlenwerte für die Effektivsättigungen an diesen Grenzen gekappt werden:

$$S_{\varphi,eff} := \min \left\{ 1; \max \left\{ 0; \frac{S_{\varphi} - S_{\varphi r}}{S_{\varphi s} - S_{\varphi r}} \right\} \right\} \quad (\varphi \in \{l, g\}). \quad (5.20c)$$

Bei den in der Software TOUGH2 implementierten Funktionen für die hier betrachteten Kapillardruck- und Relativpermeabilitätsmodelle werden die Effektivsättigungen auch gemäß



Gleichung (5.20c) gekappt, d.h. de facto werden die Funktionen $p_{cap}(S_{l,eff})$ und $K_{rel;\varphi}(S_{l,eff})$ außerhalb des Einheitsintervalles konstant fortgesetzt (bei einem Rand mit $p_{cap} \rightarrow \infty$ MPa wird ggf. ein vom Benutzer oder programmintern festgelegter Maximalwert verwendet, mit dem die entsprechende Funktion dann auch unterhalb von $S_{l,eff} = 0\%$ fortgesetzt wird).

Das Druckgleichgewicht aus Gleichung (5.16) kann nun mithilfe der Effektivsättigung mit einer entsprechend abgewandelten Kapillardruckfunktion wie folgt formuliert werden:

$$p_g = p_l + p_{cap}(S_{l,eff}) \quad (5.21)$$

mit

p_{cap} Kapillardruck in MPa in Abhängigkeit der effektiven Flüssigkeitssättigung.

Außerhalb dieses Abschnittes 5.2.3.2 wird es aufgrund der Interaktion der hydraulischen mit den mechanischen Prozessen für sinnvoller befunden, auf die Formulierung $p_{cap}(S_l)$ nach Gleichung (5.16) in Termen der absoluten Sättigung anstelle der effektiven Sättigung zurückzugreifen. (Dabei sei darauf hingewiesen, dass im Allgemeinen beispielsweise $p_{cap}(S_{l,eff} = 30\%) \neq p_{cap}(S_l = 30\%)$ gilt, hingegen jedoch $p_{cap}(S_{l,eff} = 0\%) = p_{cap}(S_l = S_{lr})$ ist.) Der Konsistenz halber wird dort dann auch für die Relativpermeabilitäten eine absolutsättigungs-basierte Formulierung $K_{rel;\varphi}(S_l)$ verwendet.

(b) Ansätze für Kapillardruckfunktionen

Die hier verwendeten Kapillardruckfunktionen basieren auf analytischen Ansätzen zur p_{cap} - $S_{l,eff}$ -Beziehung, welche bei Auswertung von Messdaten zu unterschiedlichen Probenarten – zumeist Bodenarten – als geeignet erschienen. Diagramme zur Parameterbestimmung bzw. Parametervalidierung (curve fitting) für die jeweilige Kapillardruckfunktion sind in den entsprechenden Veröffentlichungen von Corey (1954), Brooks & Corey (1964) und van Genuchten (1980) ebenso zu finden wie Diagramme zur Validierung der dort mithilfe weiterer Ansätze erhaltenen Relativpermeabilitätsfunktionen, siehe dazu Unterabschnitt (c).



(b 1) Ansätze nach Brooks/Corey und Corey

Nachdem Corey (1954) in einem ersten Ansatz die effektive Flüssigkeitssättigung antiproportional zum Quadrat des Kapillardruckes gesetzt hatte und dieser Ansatz sich nach Brooks & Corey (1964) in den meisten Fällen als unzureichend erwiesen hat, haben die beiden Autoren diese Beziehung hinsichtlich des Exponenten generalisiert:

$$S_{l,eff} = \left(\frac{p_b}{p_{cap}} \right)^\lambda \Leftrightarrow p_{cap}(S_{l,eff}) = p_b S_{l,eff}^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (5.22)$$

mit

p_b Blasenbildungsdruck („bubbling pressure“) in MPa, d.h. Kapillardruckgrenze zwischen durchgängiger und diskreter Gasphase, $p_b = p_{cap}(1)$,

λ Porengrößenverteilungsindex, dimensionslos. In Corey (1954) ist $\lambda = 2$.

Die beiden Kapillardruckmodelle nach Brooks/Corey und Corey sind in der originalen Version des Simulators TOUGH2 nicht implementiert und hier nur für die Herleitung des Modells für die Relativpermeabilitäten nach Burdine/Corey in Unterabschnitt (c 2) aufgeführt.

(b 2) Ansatz nach van Genuchten

Eine weitere, „attraktive Klasse von $S_{l,eff}(p_{cap})$ -Funktionen“ bildet laut van Genuchten (1980) die folgende Parametergleichung:

$$S_{l,eff} = \left(\frac{1}{1 + \left(\frac{\tilde{\alpha}}{\gamma_l} p_{cap} \right)^n} \right)^m \Leftrightarrow p_{cap}(S_{l,eff}) = \frac{\gamma_l}{\tilde{\alpha}} \left(S_{l,eff}^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}} \quad (5.23)$$

mit

γ_l Flüssigkeitswichte in MPa/m,

$\tilde{\alpha}$ Formparameter in m^{-1} ,

$n; m$ Formparameter, dimensionslos.

Prinzipiell stehen bei diesem Ansatz drei unabhängige Parameter als Fitting-Stellschrauben für die Parameterableitung aus Laboruntersuchungen zur Verfügung. Bei der Ableitung von Relativpermeabilitätsfunktionen auf Basis von Gleichung (5.23) erweist es sich jedoch als



hilfreich, den Parameter $k := m - 1 + 1/n$ als natürliche Zahl zu wählen und überdies als sinnvoll, $k = 0$, d.h.

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad \Leftrightarrow \quad n = \frac{1}{1 - m} \quad (5.24)$$

zu setzen, siehe dazu Unterabschnitt (c 4). Gleichung (5.23) in der nach p_{cap} aufgelösten Form wird damit zu

$$p_{cap}(S_{l,eff}) = \frac{\gamma_l}{\alpha} \left(S_{l,eff}^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{1-m}. \quad (5.25)$$

Für $S_{l,eff} > 1$ wird die *Van-Genuchten*-Kapillardruckfunktion mit dem konstanten Zahlenwert $p_{cap}(1) = 0 \text{ MPa}$ fortgesetzt, für $S_{l,eff} \rightarrow 0$ strebt $p_{cap}(S_{l,eff}) \rightarrow \infty \text{ MPa}$.

(c) Ansätze für Relativpermeabilitätsfunktionen

Die hier verwendeten Ansätze gehen von einer vorgegebenen, sättigungsabhängigen Kapillardruckfunktion aus und berechnen aus ihr über einen statistischen Weg sättigungsabhängige Funktionen für die relativen Permeabilitäten von Flüssig- und Gasphase. In einigen der Literaturquellen wird anstelle des Kapillardruckes die ihm zugeordnete Druckhöhe der Porenflüssigkeit verwendet, wobei sich aber die Fluidwichte γ_l als Umrechnungsfaktor wieder aus der Formel herauskürzen lässt und somit schließlich dasselbe Ergebnis erhalten wird.

Die prinzipielle Vorgehensweise bei diesen Berechnungen besteht darin, den Kehrwert des Kapillardruckes über das gesamte Einheitsintervall auf eine Weise zu integrieren (z.B. quadratisch), diese Integralfläche an der Stelle der Effektivsättigung in zwei Teile aufzuteilen, die so entstandenen Teile in Relation zum Ganzen als Basis für die beiden Relativpermeabilitäten zu nehmen und schließlich je einen Faktor zur Berücksichtigung von weiteren sättigungsabhängigen physikalischen Phänomenen des Systems hinzuzunehmen. Zu den berücksichtigten Phänomenen zählen dabei die bei geringer Sättigung des jeweiligen Fluids

- stärker gewundenen und damit verlängerten Fließwege (sättigungsabhängige Tortuosität, *Brooks & Corey (1964), Mualem (1976)*) bzw.



- verminderten Verbundenheiten der Phasen an Porenübergängen (Porengeometriefaktor, „correction accounting for partial correlation between the pores [of different radii] at a given water content“, *Mualem (1976)*).

Gemäß dieser Herleitung werden bei allen hier aufgeführten Ansätzen die relativen Fluidpermeabilitäten unterhalb der jeweiligen Restsättigung konstant mit 0 und oberhalb der jeweiligen Maximalsättigung konstant mit dem Zahlenwert des tortuositätsabhängigen Faktors an $S_{\varphi;eff} = 100\%$ fortgesetzt, welcher sich sowohl beim Ansatz nach *Burdine* wie auch beim Ansatz nach *Mualem* zu 1 ergibt.

Generell kann jeder der Ansätze für Kapillardruckfunktionen aus Unterabschnitt (b) mit den folgenden Ansätzen für Relativpermeabilitätsfunktionen kombiniert werden. Hier werden allerdings nur die in den FTK-Simulator implementierten klassischen Ansatzkombinationen, jeweils direkt im Anschluss an die Einführung eines Relativpermeabilitätsansatzes, vorgestellt.

(c 1) *Ansatz nach Burdine*

Der Ansatz nach *Burdine* entsprechend *Burdine (1953)* und *Brooks & Corey (1964)* sieht eine quadratische Integration vor und verwendet als tortuositätsabhängigen Proportionalitätsfaktor $1/\tau_{rel;\varphi}(S_{\varphi;eff})$ mit der experimentell erhaltenen Beziehung

$$\tau_{rel;\varphi}(S_{\varphi;eff}) := \frac{\tau_{eff;\varphi}(S_{\varphi;eff})}{\tau} = \frac{1}{S_{\varphi;eff}^2} \quad (\varphi \in \{l; g\}) \quad (5.26)$$

mit

- $\tau_{rel;\varphi}$ relative Tortuosität der Phase φ , dimensionslos,
- $S_{\varphi;eff}$ effektive Sättigung der Phase φ , dimensionslos,
- $\tau_{eff;\varphi}$ (effektive) Tortuosität der Phase φ , dimensionslos,
- τ Tortuosität des porösen Mediums, dimensionslos.

Die relativen Permeabilitäten für Flüssig- und Gasphase ergeben sich damit zu



$$K_{rel;l} = S_{l;eff}^2 \cdot \frac{\int_0^{S_{l;eff}} \frac{1}{p_{cap}(S)^2} dS}{\int_0^1 \frac{1}{p_{cap}(S)^2} dS} ; \quad K_{rel;g} = S_{g;eff}^2 \cdot \frac{\int_0^{S_{g;eff}} \frac{1}{p_{cap}(1-S)^2} dS}{\int_0^1 \frac{1}{p_{cap}(1-S)^2} dS} \quad (5.27)$$

mit

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

p_{cap} Kapillardruck in MPa (Funktion der Flüssigkeitssättigung).

(c 2) Kombinierte Ansätze nach Burdine/Brooks/Corey und Burdine/Corey

Wird die Kapillardruckfunktion $p_{cap}(S_{l;eff}) = p_b S_{l;eff}^{-\frac{1}{\lambda}}$ nach Brooks/Corey, Gleichung (5.22), an den Burdine-Ansatz für die relativen Fluidpermeabilitäten gekoppelt, so können die Integrale in den Gleichungen (5.27) berechnet werden:

$$\frac{2+\lambda}{\lambda} p_b^2 \int_{S_1}^{S_2} \frac{1}{p_{cap}(S)^2} dS = S_2^{\frac{2+\lambda}{\lambda}} - S_1^{\frac{2+\lambda}{\lambda}} \quad \text{und} \quad \frac{2+\lambda}{\lambda} p_b^2 \int_0^1 \frac{1}{p_{cap}(S)^2} dS = 1 ; \quad (5.28a)$$

$$\frac{2+\lambda}{\lambda} p_b^2 \int_{S_1}^{S_2} \frac{1}{p_{cap}(1-S)^2} dS = (1-S_1)^{\frac{2+\lambda}{\lambda}} - (1-S_2)^{\frac{2+\lambda}{\lambda}} \quad \text{und} \quad \frac{2+\lambda}{\lambda} p_b^2 \int_0^1 \frac{1}{p_{cap}(1-S)^2} dS = 1 . \quad (5.28b)$$

Mithilfe der Zwischenschritte (5.28) werden dann die relativen Permeabilitäten nach Burdine/Brooks/Corey

$$K_{rel;l} = S_{l;eff}^2 \cdot S_{l;eff}^{\frac{2+\lambda}{\lambda}} = S_{l;eff}^{\frac{2+3\lambda}{\lambda}} ; \quad K_{rel;g} = S_{g;eff}^2 \left(1 - (1 - S_{g;eff})^{\frac{2+\lambda}{\lambda}} \right) \\ = (1 - S_{l;eff})^2 \left(1 - S_{l;eff}^{\frac{2+\lambda}{\lambda}} \right) \quad (5.29)$$

bzw. für $\lambda = 2$ die relativen Permeabilitäten nach Burdine/Corey

$$K_{rel;l} = S_{l;eff}^4 ; \quad K_{rel;g} = S_{g;eff}^2 \left(1 - (1 - S_{g;eff})^2 \right) \\ = (1 - S_{l;eff})^2 \left(1 - S_{l;eff}^2 \right) \quad (5.30)$$

erhalten.

(c 3) *Ansatz nach Mualem*

Im Gegensatz zu *Burdine* quadriert *Mualem* (1976) nicht die Integranden, sondern die Integrale, und betrachtet für den Proportionalitätsfaktor nicht nur die sättigungsbedingt veränderlichen relativen Tortuositäten der Fluidphasen, sondern berücksichtigt auch einen Einfluss der örtlich variierenden Radien der Poren und Porenkanäle auf die relativen Fluidpermeabilitäten. Diese geometrischen Unregelmäßigkeiten des Porenraumes können an Übergängen zwischen Poren und/oder Porenkanälen zu zusätzlichen Engstellen in den Fließwegen der Fluide führen, die ein vergleichbares poröses Material mit derselben Porosität, aber homogener verteilten Porendurchmessern nicht besäße. Wie die Tortuosität variiert auch dieser Porengeometriefaktor mit dem Sättigungszustand.

In Ermangelung von Methoden zur Quantifizierung sowohl der sättigungsabhängigen Tortuosität wie auch des sättigungsabhängigen Porengeometriefaktors hat *Mualem* (1976) für beide Faktoren Potenzfunktionen in S_l angesetzt und sie zu einem einzelnen Term S_l^ε verschmolzen. Auf diese Weise ist für die relative Flüssigkeitspermeabilität $K_{rel;l}$ der Proportionalitätsfaktor $S_{l,eff}^\varepsilon$ erhalten und so de facto der Exponent 2 aus dem Modell nach *Burdine*, Gleichung (5.27), verallgemeinert worden. Für die Relativpermeabilitäten folgt damit:

$$K_{rel;l} = S_{l,eff}^\varepsilon \cdot \left(\frac{\int_0^{S_{l,eff}} \frac{1}{p_{cap}(S)} dS}{\int_0^1 \frac{1}{p_{cap}(S)} dS} \right)^2 ; \quad K_{rel;g} = S_{g,eff}^\gamma \cdot \left(\frac{\int_0^{S_{g,eff}} \frac{1}{p_{cap}(1-S)} dS}{\int_0^1 \frac{1}{p_{cap}(1-S)} dS} \right)^2 \quad (5.31)$$

mit

- ε Porenverbundenheitsparameter der Flüssigphase,
- γ Porenverbundenheitsparameter der Gasphase

(„pore connectivity parameter“, *Luckner et al., 1989*). In *Mualem* (1976) wurde dabei lediglich die relative Flüssigkeitspermeabilität behandelt. Eine Übertragung auf $K_{rel;g}$ ist beispielsweise in *Parker et al. (1987)* zu finden – dort unter Berücksichtigung des die Gaspermeabilität bei geringen Porendurchmessern steigernden *Klinkenberg*-Effektes, welcher jedoch auch als ein zur Sättigungsabhängigkeit der Gaspermeabilität paralleler Effekt gesehen werden kann und daher in Gleichung (5.31) nicht auftaucht.



Mualem (1976) hat über eine Auswertung von Messdaten aus Literaturquellen einen statistischen Mittelwert von $\varepsilon = \frac{1}{2}$ ermittelt. Für γ wurden verschiedene Zahlenwerte angesetzt, so zum Beispiel $\gamma = \frac{1}{3}$ in *Luckner et al. (1989)* oder $\gamma = \frac{1}{2}$ in *Parker et al. (1987)*.

(c 4) *Kombinierter Ansatz nach Mualem/van Genuchten*

Eine Kopplung der Kapillardruckfunktion $p_{cap}(S_{l,eff}) = \frac{\gamma_l}{\alpha} \left(S_{l,eff}^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}}$ nach *van Genuchten*, Gleichung (5.23), an die Formeln für die relativen Permeabilitäten nach *Mualem* führt zu etwas aufwändiger zu integrierenden Integranden, unter anderem mit einer Transformation der Integrationsvariablen:

$$\frac{\gamma_l}{\alpha} \int_{S_1}^{S_2} \frac{1}{p_{cap}(S)} dS = \int_{1-S_2^{1/m}}^{1-S_1^{1/m}} m \frac{(1-\tilde{S})^k}{\tilde{S}^{1/n}} d\tilde{S}, \quad (5.32a)$$

wobei $k := m - 1 + 1/n$. Für natürliche Zahlenwerte von k lässt sich der binomische Term im Zähler von Gleichung (5.32a) ausmultiplizieren und das Integral ohne Schwierigkeiten berechnen. In *van Genuchten (1980)* wurden die Möglichkeiten $k \in \{0;1\}$ betrachtet, wobei sich die Wahl $k = 1$ aufgrund komplizierterer Gleichungen mit geringem zahlenmäßigen Unterschied im Vergleich zu den Gleichungen für $k = 0$ als wenig sinnvoll erwiesen hat. Mit $k = 0$ und somit $1/n = 1 - m$ ergibt sich aus Gleichung (5.32a):

$$\frac{\gamma_l}{\alpha} \int_{S_1}^{S_2} \frac{1}{p_{cap}(S)} dS = \left(1 - S_1^{\frac{1}{m}}\right)^m - \left(1 - S_2^{\frac{1}{m}}\right)^m \quad \text{und} \quad \frac{\gamma_l}{\alpha} \int_0^1 \frac{1}{p_{cap}(S)} dS = 1; \quad (5.32b)$$

$$\frac{\gamma_l}{\alpha} \int_{S_1}^{S_2} \frac{1}{p_{cap}(1-S)} dS = \left(1 - (1 - S_2)^{\frac{1}{m}}\right)^m - \left(1 - (1 - S_1)^{\frac{1}{m}}\right)^m \quad \text{und} \quad \frac{\gamma_l}{\alpha} \int_0^1 \frac{1}{p_{cap}(1-S)} dS = 1. \quad (5.32c)$$

Die Funktionen für die relativen Fluidpermeabilitäten nach *Mualem/van Genuchten* können dann durch Einsetzen der Gleichungen (5.32b,c) in die Gleichungen (5.31) erhalten werden:

$$K_{rel;l} = S_{l,eff}^{\varepsilon} \cdot \left(1 - \left(1 - S_{l,eff}^{\frac{1}{m}}\right)^m\right)^2; \quad K_{rel;g} = S_{g,eff}^{\gamma} \cdot \left(1 - \left(1 - S_{g,eff}^{\frac{1}{m}}\right)^m\right)^{2m} \quad (5.33)$$

$$= (1 - S_{l,eff})^{\gamma} \cdot \left(1 - S_{l,eff}^{\frac{1}{m}}\right)^{2m}.$$



Wie bereits in *Mualem (1976)* wurde in *van Genuchten (1980)* lediglich die relative Flüssigkeitspermeabilität behandelt; eine analoge Herleitung der relativen Gaspermeabilität in der Art und Weise von *Mualem/van Genuchten* ist wiederum in *Parker et al. (1987)* zu finden.

(d) *Benutzung in TOUGH2*

Der Simulator TOUGH2 stellt in seiner originalen Version von 1999 diverse Modelloptionen für relative Fluidpermeabilitäten und Kapillardrücke zur Verfügung, welche sowohl einfache Funktionen (z.B. $p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}$, $K_{rel;\varphi}$ linear) wie auch komplexere Funktionen zu verschiedenen Theorien (z.B. p_{cap} nach *Leverett*, $K_{rel;\varphi}$ nach *Verma*) abdecken. In späteren Weiterentwicklungen des Simulators wie TOUGH2-MP oder iTOUGH2 wurden diese Sammlungen noch ergänzt, *Zhang et al. (2008)* bzw. *Finsterle (2013)*, wobei diese weiterentwickelten Simulatoren dem LfD&G zu der Zeit der Vorhabensbearbeitung nicht vorgelegen haben. Im Fortran-Quellcode von TOUGH2 ist es darüber hinaus möglich, weitere sättigungsabhängige Funktionen für Relativpermeabilitäten und Kapillardrücke zu implementieren, welche dann – zusammen mit ggf. enthaltenen Parametern – vom TOUGH2-Benutzer den gewünschten Materialbereichen des Modells zugeordnet werden können.

In der dem LfD&G vorliegenden originalen Version von TOUGH2 sind unter anderem die folgenden Modelle implementiert, *Pruess et al. (1999)*:

- relative Permeabilitäten nach *Burdine/Corey*, d.h. mit $\lambda = 2$ fixiert:

$$K_{rel;l} = S_{l;eff}^4 ; \quad K_{rel;g} = (1 - S_{l;eff})^2 (1 - S_{l;eff}^2) \quad (\text{siehe Gleichungen (5.30)})$$

(Modell Nr. 3 mit den einstellbaren Parametern S_{lr} ; S_{gr}),

- relative Permeabilitäten nach *Grant (1977)*:

$$K_{rel;l} = S_{l;eff}^4 ; \quad K_{rel;g} = 1 - K_{rel;l} \quad (5.34)$$

(Modell Nr. 4 mit den einstellbaren Parametern S_{lr} ; S_{gr}),

- Kapillardruck nach *van Genuchten* mit einstellbarem Maximalwert p_{max} zur Gewährleistung der numerischen Stabilität (voreingestellt auf $\infty \text{ MPa}$):

$$p_{cap}(S_{l;eff}) = \min \left\{ p_{max}; p_{cap0} \left(S_{l;eff}^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{1-m} \right\} \quad \text{mit} \quad p_{cap0} = \frac{\gamma_l}{\alpha} \quad (\text{siehe Gleichung (5.25)})$$

(Modell Nr. 7 mit den einstellbaren Parametern m ; S_{lr} ; $1/p_{cap0}$; p_{max} ; S_{ls}),



- relative Flüssigkeitspermeabilität nach *Mualem/van Genuchten* mit $\varepsilon = 1/2$ fixiert:

$$K_{rel;l} = S_{l,eff}^{\frac{1}{2}} \cdot \left(1 - \left(1 - S_{l,eff}^{\frac{1}{m}} \right)^m \right)^2 \quad (\text{siehe Gleichungen (5.33)})$$

sowie relative Gaspermeabilität $K_{rel;g} = 1 - K_{rel;l}$ oder nach *Burdine/Corey*:

$$K_{rel;g} = (1 - S_{l,eff})^2 (1 - S_{l,eff}^2) \quad (\text{siehe Gleichungen (5.30)})$$

(Modell Nr. 7 mit den einstellbaren Parametern m ; S_{lr} ; S_{ls} ; S_{gr} ;

wobei S_{gr} anstelle von S_{ls} bei der Berechnung von $K_{rel;g}$ nach *Burdine/Corey* verwendet wird).

Die Möglichkeit zur Verwendung von relativen Gaspermeabilitäten nach dem Modell von *Mualem/van Genuchten* anstelle nach demjenigen von *Burdine/Corey* ist in der originalen Version von TOUGH2 noch nicht enthalten, sondern erst z.B. in iTOUGH2, *Finsterle (2013)*.

Im Rahmen der Modifikationen am Simulator TOUGH2 durch den LfD&G ist der Fortran-Quellcode des Simulators um die vollständigen Modelle für die Relativpermeabilitäten für beide Phasen nach *Burdine/Brooks/Corey* und nach *Mualem/van Genuchten* sowie um das Modell für den Kapillardruck nach *Brooks/Corey* gemäß den entsprechenden Gleichungen aus den vorangehenden Abschnitten 5.2.3.2(b) und 5.2.3.2(c) ergänzt worden.

5.3 Zusammenführung der einzelnen Modelle / THM-Kopplungsbeziehungen

Für die Kopplung von geomechanischen und thermohydraulischen Prozessen sind Gleichungen aus Abschnitt 5.2.3.1 zu modifizieren und um weitere Beziehungen zu ergänzen. Die im FTK-Simulator verwendeten THM-Kopplungsbeziehungen werden im Folgenden beschrieben, wobei eine M→T-Kopplung – also ein Einfluss der mechanischen auf die thermischen Prozesse wie z.B. die Änderung thermischer Parameter durch eine isotrope oder deviatorische Beanspruchungsänderung – als vernachlässigbar betrachtet werden kann und daher im FTK-Simulator nicht implementiert worden ist, vergleiche dazu auch Bild 1.1 auf Seite 24 des Teils I des vorliegenden Berichts.

T↔H-Kopplungsbeziehungen

Mit dem Programm TOUGH2 können vollständig T↔H-gekoppelte numerische Simulationen durchgeführt werden. Der T→H-Kopplungseinfluss manifestiert sich in TOUGH2 in der

Temperaturabhängigkeit vieler hydraulischer Fluideigenschaften wie Dichte, Viskosität und Aufnahmefähigkeit für „phasenfremde“ Komponenten (Wasserdampf in Gasphase, gelöste Luft bzw. gelöster Wasserstoff in Flüssigphase) mit Beziehungen und Zahlentabellen aus *IFC (1967)* für Wasser, dem idealen Gasgesetz für Luft und teilweise auch für Wasserstoff, *Hirschfelder et al. (1954)* für Luft-Dampf-Gemische, *Loomis (1928)* für die Löslichkeit von Luft in Wasser sowie *Vargaftik (1975)* und *Dean (1985)* für Wasserstoff. Der H→T-Kopplungseinfluss über die Konvektion wurde bereits in Abschnitt 5.2.2 beschrieben und in Gleichung (5.9) wiedergegeben, mit Gleichung (5.35) als relevantem Teil:

$$q_E^{conv} = \sum_{\varphi} \left(h_{\varphi} \sum_{\kappa} q_{m;\kappa\varphi} \right) \quad (5.35)$$

mit

q_E^{conv} Wärmeenergiestromdichte durch Konvektion in J/m^2s ,

h_{φ} spezifische Enthalpie in J/kg ,

$q_{m;\kappa\varphi}$ Massenstromdichte (hydraulisches Strömungsfeld) in kg/m^2s .

TH→M-Kopplungsbeziehungen

FLAC^{3D} unterstützt in gewissem Umfang thermohydraulische Prozesssimulationen und besitzt daher auch entsprechende Funktionen für die Kopplung der TH-Prozesse mit den mechanischen Prozessen, wobei dort eine M→T-Kopplung vernachlässigt wird. Zur Berücksichtigung der TH-Einflüsse auf die mechanischen Prozesse genügt es unter Angabe der benötigten Parameter prinzipiell, die entsprechenden Größen Porendruck und Temperatur mithilfe der FLAC^{3D}-internen Programmiersprache FISH auf die von TOUGH2 berechneten neuen Zahlenwerte zu setzen, so dass FLAC^{3D} die effektiven Spannungen und die thermischen Verzerungsanteile anhand der Änderungen dieser Größen aktualisieren kann. Diese automatisierte Aktualisierung erlaubt es, weitere benutzerseitige Beziehungen, die den Porendruck und/oder die Temperatur beeinflussen, in FLAC^{3D} zu implementieren. Gleichung (5.36) gibt die H→M-Berechnungsvorschrift für die mechanisch effektiven Spannungen aus den totalen Spannungen unter Verwendung der *Biot*-Theorie wieder, während in Gleichung (5.37) der T→M-Zusammenhang über die thermisch induzierte Verzerrung angegeben ist:



$$\sigma_{eff} = \sigma_{tot} - \alpha p_l \cdot I \quad (5.36)$$

$$\dot{\varepsilon}^{th} = -\alpha_{th} \dot{T} \cdot I \quad (5.37)$$

mit

σ_{eff} Effektivspannungstensor in *MPa* ,

σ_{tot} Totalspannungstensor in *MPa* ,

α Biot-Koeffizient, dimensionslos,

p_φ Porenfluiddruck in *MPa* ,

ε^{th} thermischer Verzerrungstensor, dimensionslos,

α_{th} thermischer Längenausdehnungskoeffizient in $1/K$,

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

Da FLAC^{3D} keine Zweiphasenflussprozesse unterstützt und daher nicht zwischen unterschiedlichen Porenfluiddrücken p_l und p_g differenziert, ist im Rahmen des FTK-Simulators für die Realisierung des H→M-Einflusses gemäß Gleichung (5.36) ein geeigneter äquivalenter Porenndruck p aus den Porenndrücken der einzelnen Phasen $\varphi \in \{l; g\}$ zu bestimmen, der anstelle von p_l in die Berechnung der Effektivspannungen eingeht. Dieser äquivalente Porenndruck wird wie in *Rutqvist et al. (2002)* als das über die Volumenanteile gewichtete Mittel gewählt und eine entsprechend aktualisierte Form von Gleichung (5.36) erhalten:

$$p = \sum_{\varphi} S_{\varphi} p_{\varphi} \quad (5.38)$$

$$\Rightarrow \sigma_{eff} = \sigma_{tot} - \alpha p \cdot I \quad (5.39)$$

mit

p Porenmischdruck (äquivalenter Porenndruck für FLAC^{3D}) in *MPa* ,

S_{φ} Sättigung, dimensionslos.

M→H-Kopplungsbeziehungen

Für die TM→H-Kopplung wird in FLAC^{3D} als zentrale Kopplungsgleichung eine Erweiterung der Gleichung (5.18), also der Beziehung zwischen dem Wasserzuflussvolumen im Po-

renraum und der Änderung des hydraulischen Zustands (Größe p_l bei Vollsättigung bzw. S_l bei Teilsättigung), verwendet, die die Einflüsse der geomechanisch induzierten Volumenverzerrung und der thermisch induzierten Verzerrung des Mediums auf die Zustandsänderung berücksichtigt:

$$\frac{1}{\tilde{M}_l} \dot{p}_l + \frac{\phi}{S_l} \dot{S}_l = \frac{1}{S_l} \dot{\zeta}_{V/V;l} + \alpha \dot{\varepsilon}_{vol}^m + \beta_{th} \dot{T} \quad (5.40)$$

mit

\tilde{M}_ϕ Biot-Modul in *MPa* (zur Definition von \tilde{M}_l siehe Gleichung (5.18)),

ϕ Porosität des Mediums, dimensionslos,

$\zeta_{V/V;\phi}$ akkumuliertes Volumen des zugeströmten Fluids pro m^3 Medium, dimensionslos,

ε_{vol} Volumenverzerrung, dimensionslos, $\varepsilon_{vol} = \varepsilon_{vol}^m + \varepsilon_{vol}^{th}$,

ε_{vol}^m ; ε_{vol}^{th} mechanische und thermische Volumenverzerrungsanteile, dimensionslos,

β_{th} undrainierter thermischer Raumausdehnungskoeffizient des Mediums in $1/K$,

\tilde{K}_ϕ Kompressionsmodul in *MPa*,

\tilde{K} drainierter Kompressionsmodul des porösen Mediums in *MPa*.

Dabei ist anzumerken, dass nach *Itasca (2009)* der undrainierte thermische Raumausdehnungskoeffizient β_{th} neben der Raumausdehnung des Wassers auch die des Korngerüsts beinhaltet und somit die thermische Volumenverzerrung ε_{vol}^{th} über den Temperaturterm anstatt über den Verzerrungsterm in diese FLAC^{3D}-interne TM→H-Kopplungsgleichung (5.40) eingeht.

Für die noch fehlende M→H-Kopplung im FTK-Simulator erscheint nun mit Blick auf die Vergleichbarkeit der Simulatoren FLAC^{3D} und FTK-EOS9 (FTK unter Verwendung des Einphasenflussmoduls EOS9 in TOUGH2) und der Ähnlichkeit ihrer Strömungsberechnungsmethoden der entsprechende M→H-Anteil aus Gleichung (5.40) interessant. Hierbei ist jedoch eine Rückkopplung der mechanischen Gebirgsverzerrungen auf die Porendrücke und Sättigungen beider Fluide simultan zu berücksichtigen gewesen – sowohl für den Zweiphasenfluss wie auch aufgrund des in TOUGH2-EOS9 stets präsenten Kapillardrucks (i.Allg. $p_l \neq p_g$) für den Einphasenfluss. Der auf zweidimensionale Modellgeometrien beschränkte Simulator FLAC unterstützt im Gegensatz zu FLAC^{3D} aber auch Zweiphasenflusssimulationen und ent-

hält daher eine zu Gleichung (5.40) analoge zweiphasig formulierte Gleichung (5.41), in der allerdings zum Zeitpunkt der Implementierung der FTK-Funktionen (FLAC-Version 7) noch weder die *Biot*-Theorie noch eine thermische Kopplung berücksichtigt wird:

$$\frac{\phi}{\bar{K}_\varphi} \dot{p}_\varphi + \frac{\phi}{S_\varphi} \dot{S}_\varphi = \frac{1}{S_\varphi} \dot{\zeta}_{V/V;\varphi} + \dot{\varepsilon}_{vol}^m \quad (5.41)$$

Im Gegensatz zur Gleichung (5.40) für den Einphasenfluss, bei der lokal stets nur eine der beiden hydraulischen Zustandsgrößen p_l und S_l von den ablaufenden THM-Prozessen berührt wird (außer bei Zustandswechseln vollgesättigt↔teilgesättigt), verändern sich in Gleichung (5.41) die Größen p_φ und S_φ generell zeitgleich.

Wird nun in einem Ansatz die Definition des *Biot*-Moduls für Wasser bzw. die Flüssigphase nach Gleichung (5.18) auf die Gasphase übertragen, d.h.

$$\bar{M}_\varphi = \frac{\bar{K}_\varphi}{\phi + (\alpha - \phi) \cdot (1 - \alpha) \cdot \bar{K}_\varphi / \bar{K}} \quad (5.42)$$

so ergibt sich für die M→H-Kopplung des FTK-Simulators die folgende zweiphasig formulierte Gleichung (5.43). Da im FTK-Simulator die geomechanischen und die thermohydraulischen Prozesse sequenziell ausgeführt werden und insbesondere während der geomechanischen Teilsimulationen in FLAC^{3D} weder Temperaturänderungen auftreten ($\dot{T} = 0 \text{ K/s}$) noch hydraulische Strömungsprozesse ablaufen ($\dot{\zeta}_{V/V;\varphi} = 0 \text{ s}^{-1}$), können für Gleichung (5.43) die entsprechenden Terme vernachlässigt werden. Die aus der Vernachlässigung des Temperaturterms resultierende Vernachlässigung des T→M→H-Einflusses (Porendruck-/Sättigungsanpassung aufgrund von thermisch induzierten Verzerrungen des Korngerüsts) kann durch die Verwendung von ε_{vol} anstelle von ε_{vol}^m behoben werden. Insgesamt ergibt sich also für die M→H-Kopplungsgleichung:

$$\frac{1}{\bar{M}_\varphi} \dot{p}_\varphi + \frac{\phi}{S_\varphi} \dot{S}_\varphi = \alpha \dot{\varepsilon}_{vol} \quad (5.43)$$

Dieses Gleichungspaar (für $\varphi = g$ und $\varphi = l$) ist für den FTK-Simulator manuell nachzuimplementieren gewesen. Zur Bestimmung von \bar{M}_g wird dabei im FTK-Simulator für den



Kompressionsmodul der Gasphase die aus dem idealen Gasgesetz resultierende Beziehung $\tilde{K}_g = p_g$ als Näherung verwendet.

Das Gleichungspaar (5.43) bildet mit den Gleichungen (5.14) und (5.16) zum Zusammenhang der Sättigungen bzw. Porendrücke der beiden auftretenden fluiden Phasen ein aus vier Gleichungen bestehendes nichtlineares Gleichungssystem in den vier Unbekannten p_g, p_l, S_g und S_l , das numerisch zu lösen ist, vgl. dazu Abschnitt 6.2.3.

5.4 Analytische Lösungen zu einfachen Aufgabenstellungen

Die hier vorgestellten analytischen Lösungen beziehen sich aus hydraulischer Sicht auf den Einphasenfluss und sind aus den Gleichungen aus FLAC^{3D} hergeleitet bzw. direkt aus *Itasca* (2009) übernommen worden. Die für die HM-gekoppelte Einphasenflussmodellierung mit dem linear-elastischen Stoffmodell nach *Hooke* benötigten Gleichungen (5.11), (5.13), (5.40), (5.3), (5.36), (5.4/5.5b) und (5.6a) aus FLAC^{3D} lauten in ihrer eindimensionalen Fassung (d.h. für ein eigentlich dreidimensionales, aber in y- und z-Richtung invariables Modell mit einer Einheitsquerschnittsfläche von $1m^2$) mit einer Rotationskorrektur von $\zeta_{corr} = 0 MPa/s$ und unter Vernachlässigung der Erdbeschleunigung, der Querdehnung, des Kapillardruckes und von Quellen wie folgt:

$$-q'_{V;l} = \dot{\zeta}_{V/V;l} \quad (5.44a)$$

$$q_{V;l} = -K_{rel;l}(S_l) \cdot k_l \cdot p'_l \quad (5.44b)$$

$$\frac{1}{M_l} \dot{p}_l + \frac{\phi}{S_l} \dot{S}_l = \frac{1}{S_l} \dot{\zeta}_{V/V;l} + \alpha \dot{\varepsilon} \quad (5.44c)$$

$$\sigma'_{tot} = 0 MPa/m \quad (5.44d)$$

$$\sigma_{eff} = \sigma_{tot} - \alpha p_l \quad (5.44e)$$

$$\dot{\sigma}_{eff} = \zeta_{eff}^{\perp} = E \dot{\varepsilon} \quad (5.44f)$$

$$\varepsilon = -\ln(1 + u') \quad (5.44g)$$



mit

- $q_{V;l}$ Volumenstromdichte (Filtergeschwindigkeit) in m/s ,
- $\zeta_{V/V;l}$ akkumuliertes Volumen des zugeströmten Wassers pro m^3 Medium, dimensionslos,
- $K_{rel;l}$ relative Permeabilität, dimensionslos,
- S_l Sättigung, dimensionslos,
- k_l Mobilität in $m^2/(MPa \cdot s)$,
- p_l Porenwasserdruck in MPa ,
- \tilde{M}_l Biot-Modul in MPa ,
- ϕ Porosität des Mediums, dimensionslos,
- α Biot-Koeffizient, dimensionslos,
- ε wahre Verzerrung, dimensionslos,
- σ_{tot} Totalspannung in MPa ,
- σ_{eff} Effektivspannung in MPa ,
- ζ_{eff}^{-1} mitrotierender Effektivspannungsratentensor in MPa/s ,
- E Elastizitätsmodul oder Youngscher Modul in MPa ,
- u Verschiebung in m (u' ist auf die Ausgangskonfiguration bezogen).

Die Volumenverzerrung ε_{vol}^m in Gleichung (5.40/5.44c) reduziert sich hierbei aufgrund der Eindimensionalität und des fehlenden thermischen Anteils auf die wahre Verzerrung ε , die auch in den Gleichungen (5.44f/g) auftritt. Die ursprünglich in der *Euler*-Betrachtungsweise formulierte Gleichung (5.44d) hat in der *Lagrange*-Betrachtungsweise dieselbe Gestalt, da der ortskonstante Zahlenwert für σ_{tot} bei der Transformation erhalten bleibt. Es wird ferner angenommen, dass die Materialparameter unabhängig von Zeit und Ort sind.

Einsetzen der Gleichungen (5.44a/b) in Gleichung (5.44c) und der Gleichung (5.44e) in Gleichung (5.44f) liefert die Beziehungen:

$$\frac{1}{\tilde{M}_l} \dot{p}_l + \frac{\phi}{S_l} \dot{S}_l = \frac{k_l}{S_l} (K_{rel;l}(S_l) \cdot p_l)' + \alpha \dot{\varepsilon} \quad (5.45a)$$

$$\dot{\varepsilon} = \frac{1}{E} \dot{\sigma}_{tot} - \frac{\alpha}{E} \dot{p}_l \quad (5.45b)$$

Dabei sind die Ableitungen in $(K_{rel;l}(S_l) \cdot p_l)'$ die einzigen verbliebenen Ableitungen, die in der *Euler*-Betrachtungsweise formuliert sind. Für kleine Deformationen können jedoch auch sie in guter Näherung in der *Lagrange*-Betrachtungsweise interpretiert werden. Unter Vollsättigung wird Gleichung (5.45a) weiter zu $\dot{p}_l = k_l \tilde{M}_l p_l'' + \alpha \tilde{M}_l \dot{\epsilon}$ und in Verbindung mit Gleichung (5.45b) wird erhalten:

$$\dot{p}_l = \frac{k_l E \tilde{M}_l}{E + \alpha^2 \tilde{M}_l} p_l'' + \frac{\alpha \tilde{M}_l}{E + \alpha^2 \tilde{M}_l} \dot{\sigma}_{tot} \quad (5.46)$$

Eine Differenzialgleichung in der Form von Gleichung (5.46) wird in *Itasca (2009)* zur Beschreibung der Porenwasserdruckentwicklung in einem Konsolidationsbeispiel, das auch hier in Abschnitt 6.4.2.4 zur Verifikation herangezogen werden wird, angegeben.

Für verschiedene weitere Spezialfälle vereinfacht sich das Gleichungssystem (5.45a/b) wie folgt:

- hydraulisch/hydraulisch-mechanisch stationärer Zustand:

$$0 \frac{MPa}{m^2} = (K_{rel;l}(S_l) \cdot p_l)' \quad (\rightarrow \text{bei Vollsättigung: } p_l'' = 0 \frac{MPa}{m^2}) \quad (5.47)$$

- nur hydraulische Strömungsprozesse:

$$\frac{1}{\tilde{M}_l} \dot{p}_l + \frac{\phi}{S_l} \dot{S}_l = \frac{k_l}{S_l} (K_{rel;l}(S_l) \cdot p_l)' \quad (\rightarrow \text{bei Vollsättigung: } \dot{p}_l = k_l \tilde{M}_l \cdot p_l'') \quad (5.48)$$

Aufgrund des fehlenden Deformationsprozesses fallen die Momentankonfigurationen hier mit der Ausgangskonfiguration zusammen.

- instantane Spannungsausbalancierung (keine Strömungsprozesse, d.h. $\Delta \zeta_{V/V;l} \equiv 0$):

$$\frac{E + \alpha^2 \tilde{M}_l}{E \tilde{M}_l} \Delta p_l + \phi \ln(PS_l) = \frac{\alpha}{E} \Delta \sigma_{tot} \quad (\rightarrow \text{bei Vollsätt.: } \Delta p_l \equiv \frac{\alpha \tilde{M}_l}{E + \alpha^2 \tilde{M}_l} \Delta \sigma_{tot}) \quad (5.49)$$

Zeitableitungen sind hier durch Differenzen Δ (Endwert minus Startwert) bzw. bei Bezug auf den Momentanwert der abzuleitenden Größe durch den Logarithmus des Quotienten P (Endwert dividiert durch Startwert) ersetzt worden.

Die folgende Gleichung (5.50) für die Verschiebung zu Gleichung (5.49) und ggf. zu Gleichung (5.47) ergibt sich aus den Gleichungen (5.45b) und (5.44g), ebenfalls durch den Über-



gang von Zeitableitungen zu Differenzen. Die Verschiebung und damit auch die Verzerrung betragen dabei zu Beginn $u \equiv 0m$ und $\varepsilon \equiv 0$, d.h. $\Delta u = u$ und $\Delta \varepsilon = \varepsilon$:

$$u' = e^{\frac{1}{E}(\alpha \Delta p_l - \Delta \sigma_{tot})} - 1 \quad (5.50)$$

Aufbau der eindimensionalen Modelle

Zur Förderung des Verständnisses für den Simulator TOUGH2 und für hydraulische Prozessabläufe sowie für die Verifikation des FTK-Simulators ist in diesem Vorhaben mehrfach ein eindimensionales Berechnungsbeispielmodell bestehend aus zehn in x-Richtung aneinandergereihten würfelförmigen Zonen mit jeweils 1m Kantenlänge herangezogen worden. Die skalare Größe X für die räumliche Beschreibung des Modells bewegt sich also in den Grenzen $0m \leq X \leq 10m$. Die Ränder in den anderen beiden Dimensionen sind dabei hydraulisch undurchlässig modelliert und mechanisch in der Normalenrichtung unverschieblich gelagert bei einer Poissonzahl von $\nu = 0$, so dass effektiv nur eine Modelldimension für die mechanischen und/oder hydraulischen Prozesse zum Tragen kommt. Die anfänglichen Verschiebungen und Verzerrungen betragen stets 0.

Mit diesem Modell sind unterschiedliche, eher abstrakte bzw. stark vereinfachte Szenarien unter entsprechender Variation von Prozessen, Parametern und Randbedingungen simuliert worden.

Ein weiteres Modellbeispiel behandelt einen Konsolidierungsprozess in einer 20m dicken Bodenschicht. Das vereinfachte eindimensionale Modell besteht hier aus 20 in z-Richtung aneinandergereihten Zonen ($-20m \leq Z \leq 0m$). Die elastische Querdehnung wird hier im Gegensatz zu den anderen Modellbeispielen berücksichtigt ($\nu \neq 0$) und es liegt ein linearer Verzerrungszustand in z-Richtung vor mit $\varepsilon_x \equiv \varepsilon_y \equiv 0$. Alle anderen Bedingungen sind wie oben angegeben.

Analytische Lösungen für drei eindimensionale Szenarien

(1) Mechanische Entlastung einer wasserundurchlässigen Tragstruktur

Betrachtet wird das in Bild 5.1 dargestellte Modell einer homogenen, porösen und wassergesättigten, aber sowohl im Inneren zwischen den Modellzonen wie auch an den Modellrändern

wasserundurchlässigen Tragstruktur (dort dargestellt durch das Symbol $\underline{\underline{\Delta}}$), der am linken Rand in x-Richtung verschieblich und am rechten Rand räumlich fixiert ist (Symbol $\underline{\Delta}$). Strömungsprozesse finden hier nicht statt, eine H \leftrightarrow M-Kopplung erfolgt dennoch über die Gleichungen (5.49) und (5.50).

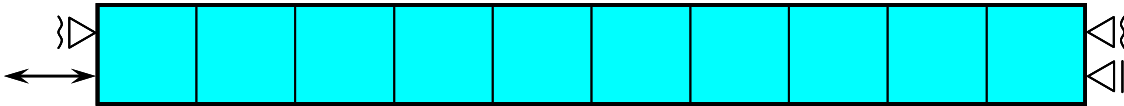


Bild 5.1: Beispielmodell 1 – schematische Randbedingungen

Die instantane Spannungumlagerung, die durch eine mechanische Entlastung der Tragstruktur um $\Delta\sigma_{tot} < 0 \text{ MPa}$ gleichmäßig im Modell nach Gleichung (5.44d) hervorgerufen wird, bewirkt zunächst einen Porenwasserdruckabbau und kann darüber hinaus auch die Sättigung herabsetzen, falls der Porenwasserdruck auf diese Weise unter den Referenzdruck der Gasphase $p_{g,ref}$ fällt. Für den Fall der Vollsättigung berechnen sich der Porenwasserdruck und die Verschiebung nach den Gleichungen (5.49) und (5.50) zu:

$$p_l(X) \equiv p_p + \frac{\alpha \tilde{M}_l}{E + \alpha^2 \tilde{M}_l} \Delta\sigma_{tot} \quad (5.51a)$$

$$u(X) = \left(e^{\frac{\Delta\sigma_{tot}}{E + \alpha^2 \tilde{M}_l}} - 1 \right) (X - 10m) \quad (5.51b)$$

mit

p_p Porenwasserdruck im Ausgangszustand („primär“) in MPa .

Wird der Referenzdruck der Gasphase durch die Entlastung der Tragstruktur unterschritten, d.h. $p_p + \Delta p_l < p_{g,ref}$, so lässt sich der mechanische Entlastungsterm $\Delta\sigma_{tot}$ in die zwei Anteile $\Delta\sigma_{tot}^{S=1} + \Delta\sigma_{tot}^{S<1}$ aufteilen, von denen der erste den Porenwasserdruck exakt auf den Referenzdruck abfallen lässt und der zweite zur Teilentsättigung des Materials führt. Die Aufteilung des Entlastungsterms auf seine beiden Anteile wird durch Gleichung (5.51a) unter der Nebenbedingung $p_l = p_{g,ref}$ festgelegt, der Sättigungsabbau erfolgt bei vernachlässigtem Kapillardruck dann entsprechend Gleichung (5.49) mit $\Delta p_l = 0 \text{ MPa}$ und mit $\Delta\sigma_{tot}^{S<1}$ an der Stel-



le von $\Delta\sigma_{tot}$. Gleichung (5.50) liefert schließlich die Verschiebung, so dass insgesamt erhalten wird:

$$S_l(X) \equiv e^{\frac{\alpha \bar{M}_l \Delta\sigma_{tot} - (E + \alpha^2 \bar{M}_l)(p_{g,ref} - p_P)}{\phi E \bar{M}_l}} \quad (5.52a)$$

$$u(X) = \left(e^{\frac{\alpha(p_{g,ref} - p_P) - \Delta\sigma_{tot}}{E}} - 1 \right) (X - 10m) \quad (5.52b)$$

mit

$p_{g,ref}$ Referenzdruck der Gasphase in MPa.

(2) Stark idealisiertes Gebirgsmodell mit Hohlraumausbruch (HM-Entlastung)

In diesem Modellbeispiel werden zusätzlich zu den instantanen mechanisch-hydraulischen Ausbalancierungsprozessen auch hydraulische Strömungsprozesse und deren Auswirkungen auf die mechanischen Deformationen im stark vereinfachten Kontext eines eindimensionalen Gebirgsmodells, an dessen linker Seite ein Hohlraum aufgefahren wird, mitberücksichtigt. Wie das vorangehende Beispielmodell ist auch dieses in Bild 5.2 schematisch abgebildete Modell homogen und zu Beginn vollgesättigt und mechanisch eingespannt, und am zum Hohlraum gerichteten linken Rand erfolgt eine mechanische Entlastung mit Spannungsabbau bei verschieblicher Lagerung des Randes. Zusätzlich ist jetzt aber auch ein Fluidfluss möglich, der durch Festsetzung des Porenwasserdruckes am linken Rand (entspricht dem Druckniveau des Hohlraumes) bei zeitgleicher Konstanthaltung desjenigen am gebirgsseitigen rechten Rand (Festsetzung auf den Primärporenwasserdruck als Fernfeld-Randbedingung) auch induziert wird. Das Beispielmodell soll nach der mechanischen Entlastung und damit folglich auch über die gesamte Simulationszeit vollgesättigt bleiben. Betrachtet werden folgende Zustände und Zustandsentwicklungen:

- stationärer Zustand (nur hydraulisch bzw. HM-gekoppelt),
- zeitlicher Porendruckabbau bei hydraulischer Simulation,
- sich instantan ausbildender Zustand nach der HM-gekoppelten Ausbalancierung sowie
- zeitliche Porendruck- und Deformationsentwicklung bei HM-gekoppelter Simulation.



Bild 5.2: Beispielmodell 2 – schematische Randbedingungen

Bei der HM-gekoppelten Simulation erfolgen in diesem Berechnungsbeispiel der Reihe nach eine mechanische Entlastung des modellierten Gebirgsausschnittes in Verbindung mit einem in allen Zonen gleichmäßigen Abbau des primären Porendruckes (wie im vorangehenden Modellbeispiel), ein Porenwasserabstrom linksseitig in den Hohlraum und ein Porenwasserzustrom rechtsseitig aus dem Fernfeld, durch die Porendruckvariationen induzierte Deformationen, die dann ihrerseits wieder Porendruckänderungen (geringfügigere als zuvor in dieser Simulation) nach sich ziehen bis schließlich ein hydromechanischer Gleichgewichtszustand zum idealisierten Zeitpunkt $t = \infty$ erreicht wird, zu dem ein linear verteilter Porendruck einen gleichmäßigen Wasserstrom induziert und das Gebirgsmodell sich daher nicht weiter verformt. Dieser schließlich erhaltene stationäre Zustand wird durch die Gleichungen (5.47) und (5.50) bestimmt und lautet:

$$p_l(\infty; X) = (p_P - p_H) \frac{x(\infty; X)}{10m} + p_H \quad \approx (p_P - p_H) \frac{X}{10m} + p_H \quad (5.53a)$$

$$u(\infty; X) \approx \frac{E \cdot 10m}{\alpha(p_P - p_H)} \cdot e^{-\frac{\Delta\sigma_{tot}}{E}} \left(e^{\frac{\alpha(p_P - p_H)}{E} \left(\frac{X}{10m} - 1 \right)} - 1 \right) + (10m - X) \quad (5.53b)$$

mit

p_P Fernfeld-Porendruckrandwert bei $X = 10m$ (entspricht Anfangswert) in MPa ,

p_H Hohlraum-Porendruckrandwert bei $X = 0m$ in MPa .

Bei den Gleichungen (5.53a/b) handelt es sich im gekoppelten Fall wiederum nur um Näherungen für kleine Deformationen im stationären Zustand, da die lineare Verteilung von p_l in der Momentankonfiguration gilt, die Größen p_l und u jedoch in Abhängigkeit der Ausgangskonfiguration beschrieben sind und auch nach ihr integriert worden ist.

Wie anhand der Gleichung (5.47) für den stationären Porenwasserdruck ($p_i'' = 0 MPa/m$) bereits gesehen werden kann, hängt unter den vorgenommenen Vereinfachungen der hydraulische Gleichgewichtszustand in der Endkonfiguration nicht von den mechanischen Prozessen

ab und gilt daher auch für die ungekoppelte Strömungssimulation (dort dann auch exakt in der Ausgangskonfiguration, da sich das Modell nicht deformiert). Die Deformationsprozesse haben dabei im Wesentlichen einen Einfluss auf die Geschwindigkeit, mit der der stationäre Zustand erreicht wird – kompaktions- oder expansionsinduzierte Porendruckänderungen werden im Verlauf der Zeit früher oder später wieder so weit ab- bzw. aufgebaut, bis der hydraulisch stationäre Zustand erreicht ist.

Falls nur hydraulische Strömungsprozesse betrachtet werden, so ergibt sich die zeitliche Entwicklung des Porenwasserdrucks an jedem Ort im Beispielmmodell durch Lösung der parabolischen Differenzialgleichung (5.48). Dieser Gleichungstyp ist in der Physik gemeinhin auch unter dem Begriff der Wärmeleitungs- oder Diffusionsgleichung bekannt. Unter den gegebenen Anfangs- und Randbedingungen lautet ihre Lösung:

$$p_l(t; X) = p_H + (p_P - p_H) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{X}{\sqrt{4at}} \right) + \sum_{i=1}^{\infty} \left(\operatorname{erf} \left(\frac{i \cdot 20m + X}{\sqrt{4at}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{i \cdot 20m - X}{\sqrt{4at}} \right) \right) \right) \quad (5.54)$$

mit

a abkürzender Bezeichner, hier: für $k_i \tilde{M}_i$ in m^2/s .

Dabei steht erf für die Gauß'sche Fehlerfunktion

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\tilde{x}^2} d\tilde{x} \quad , \quad (5.55)$$

die zur Verifikation der Anfangs- und Randbedingungen den Funktionswert $\operatorname{erf}(0) = 0$ und den Grenzwert $\operatorname{erf}(\infty) = 1$ besitzt.

Für die Berechnung zeitabhängiger Porenwasserdruck- und Verschiebungswerte im Fall von HM-gekoppelten Prozessen sind diese beiden Zahlenwerte zunächst für die instantane Ausbalancierung zu quantifizieren, um danach das Differenzialgleichungssystem für die zeitlichen Größenentwicklungen mit den auf diese Weise erhaltenen Anfangswerten lösen zu können. Die sich instantan ergebenden Größen p_i^{el} und $u^{el}(X)$ können den Gleichungen (5.51a/b) zum Beispielmmodell 1 mit dem vorgegebenen Zahlenwert für $\Delta\sigma_{tot}$ entnommen werden. Die zeitliche Porenwasserdruckentwicklung ergibt sich dann für kleine Deformationen näherungsweise aus Gleichung (5.46) mit $\dot{\sigma}_{tot} = 0 \text{ MPa/s}$ sowie den bis dato verwendeten Randbedingungen und $p_l \equiv p_i^{el}$ als Anfangsbedingung zu Gleichung (5.56a), während für die Ver-



schiebung aufgrund der Gleichungen (5.45b) mit $\dot{\sigma}_{tot} = 0 \text{ MPa/s}$, (5.44g) und (5.51a/b) die Gleichung (5.56b) erhalten wird:

$$p_l(t; X) \approx p_H + c_0 \operatorname{erf}\left(\frac{X}{\sqrt{4at}}\right) + \sum_{i=1}^{\infty} c_i \left(\operatorname{erf}\left(\frac{i \cdot 10m + X}{\sqrt{4at}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i \cdot 10m - X}{\sqrt{4at}}\right) \right) \quad (5.56a)$$

$$u(t; X) \approx e^{-\frac{\Delta\sigma_{tot} + \alpha p_P}{E}} \int_{10m}^X e^{\frac{\alpha}{E} p_l(t; \tilde{X})} d\tilde{X} + (10m - X) \quad (5.56b)$$

mit

- c_i Koeffizienten in MPa , $c_i = p_P - p_l^{el}$ für i ungerade und $c_i = p_l^{el} - p_H$ für i gerade,
- p_l^{el} Porenwasserdruck nach instantaner Ausbalancierung in MPa (Gleichung (5.51a)),
- a abkürzender Bezeichner, hier: für $(k_l E \tilde{M}_l) / (E + \alpha^2 \tilde{M}_l)$ in m^2/s .

Aufgrund des Integralausdrucks in Gleichung (5.56b) bietet sich ein Vergleich der wahren Verzerrungen in Gleichung (5.56c) anstelle von Verschiebungen eher zur Verifikation des FTK-Simulators an:

$$\varepsilon(t; X) \approx \frac{\Delta\sigma_{tot} + \alpha(p_P - p_l(t; X))}{E} \quad (5.56c)$$

(3) Konsolidation einer Bodenschicht unter gleichförmiger Belastung

Dieses eindimensionale Beispielmodell ist an das Konsolidationsbeispiel aus dem FLAC^{3D}-Benutzerhandbuch angelehnt, *Itasca (2009)*. Es besteht aus 20 würfelförmigen Zonen mit einem Volumen von je 1 m^3 , die in z-Richtung orientiert und in x- und y-Richtung unverschieblich gelagert sind, hier allerdings im Sinn eines linearen Verzerrungszustands in z-Richtung ($\varepsilon_x \equiv \varepsilon_y \equiv 0$) mit einer Querdehnung. Der Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen ergibt sich aus diesem Grund nach Gleichung (5.5b) in Ableitungs- und Differenzschreibweise zu

$$\dot{\sigma}_{eff} = \tilde{E} \dot{\varepsilon} \quad \text{bzw.} \quad \Delta\sigma_{eff} = \tilde{E} \cdot \Delta\varepsilon \quad \text{mit} \quad \tilde{E} := 2\mu + \lambda = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (5.57)$$

mit

\tilde{E} axialer Verformungsmodul bei linearem Verzerrungszustand in *MPa*,

$\lambda; \mu$ Lamé-Konstanten in *MPa* (Gleichung (5.5b)),

ν Poissonzahl, dimensionslos,

also zu Gleichung (5.44f) mit \tilde{E} an der Stelle des Elastizitätsmoduls E . Das Berechnungsmodell ist wie das vorangehende Modell homogen, porös-permeabel sowie während des gesamten Simulationsverlaufes wassergesättigt. Sein oberer Rand stellt die Tagesoberfläche dar und ist sowohl in z-Richtung beweglich wie auch durchlässig mit auf Atmosphärendruck fixiertem Porenwasserdruck (in Analogie zu den zum Hohlraum gerichteten Rändern der vorangehenden Beispielmodelle), während der gebirgsseitige untere Rand bedingt durch die liegende Gesteinsschicht unverschieblich gelagert und – im Gegensatz zum vorangehenden Modell – wasserundurchlässig ist. Bild 5.3 zeigt das dritte Beispielmodell.

Das Aufbringen einer mechanischen Vertikallast führt nun zu einem Konsolidationsprozess, d.h. einer Kompaktion des Bodenmaterials in Verbindung mit einer Zunahme des Porenwasserdruckes, welcher sich dann im Verlauf der Zeit aufgrund des niedrigen Druckes an der Tagesoberfläche wieder abbaut und dabei die Effektivspannung auf das Korngerüst erhöht. Die äußere Last wird also mit der Zeit vom Porenwasser auf das Korngerüst übertragen und führt auf diese Weise zu weiteren Setzungen.

Insgesamt ist dieses Modellbeispiel dem vorangehenden sehr ähnlich und führt auch auf analoge Differenzialgleichungen. Die instantanen Porendruckänderungen und Verschiebungen lassen sich durch die den Gleichungen (5.51a/b) entsprechenden Gleichungen (5.58a/b) ausdrücken:



Bild 5.3: Beispielmodell 3 –
schematische
Randbedingungen



$$p_i^{el}(Z) \equiv p_P + \frac{\alpha \tilde{M}_l}{\tilde{E} + \alpha^2 \tilde{M}_l} \Delta \sigma_{tot} \quad (5.58a)$$

$$u^{el}(Z) = \left(e^{\frac{\Delta \sigma_{tot}}{\tilde{E} + \alpha^2 \tilde{M}_l}} - 1 \right) (Z + 20m) \approx - \frac{\Delta \sigma_{tot}}{\tilde{E} + \alpha^2 \tilde{M}_l} (Z + 20m) \quad (5.58b)$$

mit

p_P Porenwasserdruck im Ausgangszustand in MPa .

Im Gegensatz zu den vorangehenden Modellbeispielen ist in diesem Beispiel wie in *Itasca (2009)* die technische Verzerrung gemäß Gleichung (5.6b) ($\varepsilon = -u'$) anstelle der logarithmischen Verzerrung nach Gleichung (5.44g) herangezogen worden. Der rechte Term in der oben stehenden Gleichung (5.58b) beschreibt die aus dem Ansatz der technischen Verzerrungen hergeleiteten Verschiebungen.

Das Prinzip zur Herleitung der Gleichung für die zeitliche Porendruckentwicklung ist dasselbe wie für das vorangehende Modellbeispiel und verwendet ebenfalls die Gleichungen (5.58) und (5.46) mit $\dot{\sigma}_{tot} = 0 \text{ MPa/s}$. Es besteht zum vorangehenden Beispiel allerdings neben dem Ansatz der technischen Verzerrungen auch noch der Unterschied in der gebirgsseitigen Randbedingung (Wasserundurchlässigkeit, modelliert durch $p'_i(t; -20m) = 0 \text{ MPa/m}$). Mithilfe von Gleichung (5.45b) wird aus der zeitlichen Porendruckentwicklung schließlich die Gleichung für die zeitliche Verschiebungsentwicklung erhalten. In Anlehnung an *Itasca (2009)* ergeben sich damit unter Berücksichtigung eines generell von 0 MPa unterschiedlichen Referenzdruckes sowie unter der Tagesoberflächenrandbedingung $p_H = p_i(t; 0m) = p_P$ die folgenden Gleichungen (5.59a/b) für $p_i(t; Z)$ und $u(t; Z)$, die erneut lediglich Näherungslösungen für kleine Deformationen darstellen:

$$p_i(t; Z) \approx p_P + 2(p_i^{el} - p_P) \cdot \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{c_i} \sin\left(-Z \frac{c_i}{20m}\right) e^{-\left(\frac{c_i}{20m}\right)^2 \frac{k_l \tilde{E} \tilde{M}_l}{\tilde{E} + \alpha^2 \tilde{M}_l} t} \quad (5.59a)$$

$$u(t; Z) \approx \frac{\alpha(p_i^{el} - p_P) \cdot 20m}{\tilde{E}} \left(2 \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{c_i^2} \cos\left(Z \frac{c_i}{20m}\right) e^{-\left(\frac{c_i}{20m}\right)^2 \frac{k_l \tilde{E} \tilde{M}_l}{\tilde{E} + \alpha^2 \tilde{M}_l} t} \right) - \frac{\Delta \sigma_{tot}}{\tilde{E}} (Z + 20m) \quad (5.59b)$$



mit

c_i abkürzende Bezeichner, dimensionslos, $c_i = \pi(i + 1/2)$.

Für den stationären Zustand wird mithilfe der Randbedingungen an p_l und der Gleichungen (5.47) und (5.50) erhalten:

$$p_l(\infty; Z) \equiv p_H \quad (5.60a)$$

$$u(\infty; Z) = \left(e^{\frac{1}{\bar{E}}(\alpha(p_H - p_P) - \Delta\sigma_{tot})} - 1 \right) (Z + 20m) \quad \approx \frac{1}{\bar{E}} (\alpha(p_H - p_P) - \Delta\sigma_{tot}) (Z + 20m) \quad (5.60b)$$

mit

p_H Tagesoberflächen-Porendruckrandwert bei $Z = 0m$ in MPa .

Der rechte Term in Gleichung (5.60b) bezieht sich dabei erneut auf die über die technischen Verzerrungen hergeleiteten Verschiebungen.



6 SCHWERPUNKT „THM-SIMULATOR“: Entwicklung und Verifizierung des FLAC^{3D}-TOUGH2-Simulators für THM-gekoppelte Prozesse

6.1 Überblick über die Programmpakete FLAC^{3D} und TOUGH2 mit ihren jeweiligen Qualitäten und Anwendungsbereichen

6.1.1 Software FLAC^{3D} für geomechanische Aufgabenstellungen

In vielen weltweiten Forschungs- und Anwendungsprojekten in einem breitgefächerten Anwendungsfeld der Fachgebiete Boden- und Felsmechanik (Tunnelbau, Bergbau, Seismologie, Endlagerung radioaktiver Abfälle etc.) wird der Simulator FLAC^{3D} im Rahmen der Tragwerksplanung für die numerische Analyse insbesondere von Gebirgsspannungszuständen und Gebirgsdeformationszuständen – mitunter auch unter Berücksichtigung von T/H-Prozessen – eingesetzt. Mithilfe von FLAC^{3D} werden beispielsweise

- mechanische Einwirkungen von versetzt vorgetriebenen Tunnelbauwerken aufeinander bei der Konstruktion von Doppelröhrentunneln berechnet (*Do et al., 2015*, Italien),
- die geogene oder anthropogene Entstehung seismischer Wellen und ihre Auswirkungen auf untertägige Hohlräume im Felsgestein analysiert (*Wang et al., 2014* – Salzkavernenspeicher, China) (*Sainoki & Mitri, 2014* – Erzbergbau, Kanada) (*Wassing et al., 2014* – Geothermie, Frankreich),
- Schutzpfeiler für untertagevergaste Kohlelagerstätten unter TM-Prozesskopplung dimensioniert (*Najafi et al., 2014*, Iran) und
- Einflüsse von kleinskaligen Defekten in Prüfkörpern numerisch untersucht (*Senent et al., 2013*).

Insbesondere im Bereich der Endlagerung von radioaktiven Abfällen in tiefen geologischen Formationen findet FLAC^{3D} verbreitet Anwendung, wie z.B. in *Bollingerfehr et al. (2013)* (Projekt „ISIBEL“), *Hampel et al. (2010)* (BMBF-Verbundprojekt), *Breustedt et al. (2012)*, *Wolf et al. (2012)*, *Neubert (2014)*, *Souley et al. (2011)*, *Kwon et al. (2006)* u.a., sowie nicht zuletzt in den Berichten, Veröffentlichungen, Dissertationen und Habilitationsschriften des LfD&G – *Lux et al. (2012, 2010, 2006)*, *Rutenberg & Lux (2011)*, *Wolters (2014)*, *Lerche (2012)*, *Czaikowski (2011)*, *Düsterloh (2009)* u.a..

Der Simulator FLAC^{3D} verwendet eine explizite Finite-Differenzen-Methode (FDM) zur numerischen Lösung der Differenzialgleichungen (5.6b) (Verzerrungsraten-Verschiebungsraten-



Beziehung), (5.5a) (mechanisches Stoffmodell) und (5.3) (*Cauchy*sche Bewegungsgleichung). Zur Berechnung des Gleichgewichtszustands („Balancierung“) werden die genannten Gleichungen dabei von FLAC^{3D} sukzessiv-iterativ gelöst, d.h. in einem wiederkehrenden Zyklus werden aus vorab bekannten Knotengeschwindigkeiten Verzerrungsraten, aus den Verzerrungsraten Spannungen und aus den Spannungen wiederum aktualisierte Knotengeschwindigkeiten berechnet, bis ein Fehlerterm (die „unbalancierten Kräfte“) eine vom Benutzer angegebene Grenze unterschreitet und numerische Konvergenz signalisiert. Bei zeitabhängigen Berechnungen, also insbesondere bei HM-gekoppelten Simulationen, wird dieser Lösungsalgorithmus in jedem Zeitschritt ausgeführt, wobei eine programminterne Steuerung des maximalen Zeitschrittes sicherstellt, dass das Lösungsverfahren numerisch stabil bleibt. Der Vorteil der sichergestellten numerischen Stabilität hat bei diesem Verfahren allerdings den Nachteil, dass die Simulationsdauer bei zeitabhängigen Langzeitsimulationen mitunter extrem stark ausgedehnt ist, was beim LfD&G den Bedarf nach einem alternativen Simulator mitbegründet hat.

FLAC^{3D} verfügt über eine sehr anschauliche und verständliche grafische Benutzeroberfläche (GUI – graphical user interface) und beinhaltet somit auch eigene Prä- und Postprozessorfunktionalitäten, die die Software insgesamt sehr benutzerfreundlich gestalten. Semitransparente Modellstrukturen und Randbedingungsmarkierungen sind ebenso darstellbar wie interpolierte Niveauliniendiagramme (contour plots), interpolierte Schnitte (profiles) und aufgezeichnete Zeitreihen (histories). Eine diskretisierte Modellstruktur wird dabei vom Benutzer aus einzelnen, in ihrer geometrischen Konfiguration vorgegebenen und vordiskretisierten Teilstrukturen (primitive mesh shapes) zusammengesetzt, die ihrerseits aus jeweils mehreren Zonen aufgebaut sind. Dazu stehen einfachere vordiskretisierte Teilstrukturen wie z.B. Hexaeder und Viertelzylinder oder auch komplexere vordiskretisierte Teilstrukturen zum vereinfachten Aufbau von Tunneltragsystemen zur Verfügung. Des Weiteren umfasst das Programm FLAC^{3D} auch eine interne Programmiersprache namens FISH (abgeleitet von „FLA-Cish“), mit der neben Berechnungen von abgeleiteten Größen auch Implementierungen von zusätzlichen Prozessgleichungen wie z.B. Porositäts-Permeabilitäts-Beziehungen sowie auch eine Kommunikation mit externen Programmen über Textdateien möglich sind. Außerdem sind benutzerdefinierte mechanische Stoffmodelle über eine C++-Schnittstelle des Programms definierbar. Alle in diesem Absatz genannten Eigenschaften von FLAC^{3D} können dabei für eine Kopplung mit anderen Simulatoren durchaus vorteilhaft sein.



Die FLAC^{3D}-Berechnungen im Rahmen dieses Forschungsvorhabens sind mit der Version 4.0 durchgeführt worden, und die in diesem Bericht angegebenen Informationen über FLAC^{3D} und seine Funktionsweise stammen, wenn nicht anders angegeben, aus dem Benutzerhandbuch *Itasca (2009)*.

6.1.2 Software TOUGH2 für geothermohydraulische Aufgabenstellungen

Wie FLAC^{3D} finden auch die primär thermohydraulischen Simulatoren der TOUGH-Familie weltweit Anwendung in einer Vielzahl unterschiedlicher Disziplinen, angefangen von den ursprünglichen Zielstellungen in den eher an gesellschaftlich-technischen Aufgabenstellungen orientierten Bereichen Geothermie, Endlagerung radioaktiver Abfälle, umwelttechnische Sanierungsmaßnahmen und allgemeine Hydrologie über Druckluftspeicherung, geochemische Analysen und Vulkanismus bis hin zu industriellen Einsatzmöglichkeiten im Rahmen der Energieträergewinnung (Erdöl- und Erdgasgewinnung, CO₂-Sequestrierung, Hydraulic Fracturing, Gashydratabbau). Das grundlegende Programm TOUGH2, auf dem die modernen Simulatoren der TOUGH-Familie basieren, ist modular aufgebaut, und je nach Wahl des Moduls bzw. einer mit einem externen Simulator gekoppelten Version von TOUGH2 können dabei auch C/M-Prozesse in die Simulation eingebunden werden. Anwendungsbeispiele für TOUGH2 sind:

- die Einschätzung der Nutzbarkeit von Niedrigtemperatur-Geothermie (*Pearson et al., 2014*, Neuseeland, TOUGH2-EOS3),
- die Aufsättigung des Bentonitfüllmaterials in einem Endlager im Granitgestein (*Dessirier et al., 2012* – Forschungsbergwerk Äspö/Schweden),
- die Verhinderung des Eindringens von salinärer Lösung in Grundwasser (*Tillner et al., 2013* – Nebeneffekt der CO₂-Sequestrierung, Deutschland, TOUGH2-MP-ECO2N) (*Sun & Semprich, 2013* – Meerwasserzutritt, TOUGH2-EOS7),
- die Untersuchung der hydraulisch induzierten Entstehung und Propagation von Rissen in Festgestein (*Asahina et al., 2014*, Kopplung von TOUGH2-EOS4 mit RBSN) sowie
- die Erforschung einer Technologie zur Förderung wasserlöslicher Gase aus tiefen geologischen Lagerstätten (*Sun et al., 2014*, China, TOUGH2-EOS7C).



Der Simulator TOUGH2 ist eine Weiterentwicklung des in der Programmiersprache Fortran verfassten Simulators TOUGH aus den Achtzigerjahren des vorangegangenen Jahrhunderts. Seine Ein- und Ausgabe basieren auf Ein- und Ausgangsdateien im ASCII-Format (Textdateien) in Anlehnung an Dateneingaben mittels Lochkarten (vgl. auch Termini wie „input deck“ und „cards“ in *Pruess (1987)*). Aufgrund dieser Historie besitzt TOUGH2 keine GUI, sondern liegt nach Kompilierung des Quellcodes in Form einer ausführbaren Datei vor, welche lediglich Eingangsdateien im Textformat einliest, die Berechnung durchführt und die Resultate – ggf. mit Fehlermeldungen, falls Eingabefehler vom Benutzer oder numerische Instabilitäten vorliegen oder Abbruchkriterien erfüllt sind – in Ausgangsdateien im Textformat speichert. Mithilfe der zentralen Eingangsdatei sind auch Steuerungen des Simulationsprozesses möglich, z.B. hinsichtlich der Konvergenzkriterien oder der Ausgabe von detaillierteren Informationen zur Berechnung. Für die Ein- und Ausgangsdateien existiert jedoch kein integrierter Prä- bzw. Postprozessor; die Daten sind manuell oder mithilfe von separaten Programmen zu erstellen bzw. auszuwerten.

Die zentralen Fähigkeiten von TOUGH2 sind die Berechnung von hydraulischen Strömungsprozessen unter Berücksichtigung von Zwei- oder Mehrphasenfluss mit zwei oder mehr Komponenten, die generell in allen vorhandenen Phasen auftreten können (diese Eigenschaft kann in einzelnen Modulen eingeschränkt sein, z.B. bei weder wasserlöslichem noch flüchtigem Schweröl, „dead oil“, das im EOS-Modul 8 nur in seiner eigenen Phase auftreten kann), sowie die Simulation von konvektiven, sättigungsabhängig-konduktiven und radiativen Wärmeausbreitungsprozessen. Dabei werden die auftretenden Gleichungen

- (5.10) (Massenbilanzgleichung), (5.12) (*Darcy*-Strömungsgleichung) und (5.17) (Fluidmassenterm) unter ihren modellierungstechnischen Nebenbedingungen sowie
- (5.8) (Wärmeenergiebilanzgleichung mit Energiemengenterm), (5.9) (konvektive und konduktive Strömungsgleichungen) und die hier nicht aufgeführte *Stefan/Boltzmann*-Gleichung (Wärmestrahlung)

in einer integralen Form über eine implizite Integrale Finite-Differenzen-Methode (IFDM) simultan-iterativ gelöst. Hierzu werden die Gleichungen in jedem Zeitschritt in ein nichtlineares Gleichungssystem der Form $F(X_{neu}, X_{alt}) = 0$ in Abhängigkeit des thermodynamischen Zustands X überführt und dieses dann iterativ mit dem *Newton*-Verfahren (in *Pruess et al., 1999/2012* auch als *Newton-Raphson*-Verfahren bezeichnet) nach X_{neu} gelöst. Die Anwen-



dung eines impliziten Verfahrens hat zur Folge, dass es bei der Simulation im zeitlichen Berechnungsverlauf nicht zu Instabilitäten hinsichtlich des thermodynamischen Zustands kommt (keine Divergenz der Zeitreihenwerte) – Instabilitäten im Rahmen des *Newton*-Verfahrens bei der Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems sind gleichwohl möglich (Divergenz des Verfahrens oder des in ihm enthaltenen linearen Gleichungslösers).

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

- EOS9 – Einphasenflussprozesse: Die Gasphase wird auch im Fall der Vollsättigung als unendlich permeabel angenommen, so dass der Gasdruck stets ausbalanciert ist und die entsprechende Strömungsgleichung wegfällt. Anstelle der oben genannten Gleichungen wird zur Strömungsberechnung für die Flüssigphase die *Richards*-Gleichung (5.19) angesetzt. Andere Zweiphasenflussphänomene wie Kapillardruck oder Relativpermeabilitäten bleiben dabei aber bestehen.
- EOS3 – Zweiphasenflussprozesse mit den Komponenten Wasser und Luft, sowie
- EOS5 – Zweiphasenflussprozesse mit den Komponenten Wasser und Wasserstoff.

In den Abschnitten 6.3.1 bis 6.3.4 wird auf die vorstehend genannten Module im Rahmen von ersten Berechnungen mit TOUGH2 näher eingegangen.

Die Abteilung Hydrogeologie der Erdwissenschaftsddivision des LBNL hat seit über einem Jahrzehnt zahlreiche Erfahrungen mit der eigens implementierten Kopplung der Simulatoren TOUGH2 und FLAC^{3D} gesammelt, *Rutqvist et al. (2002)*, *Rutqvist (2011)*, *Hudson et al. (2012)*, *Rutqvist et al. (2012) & Kim et al. (2012)*, *Rutqvist et al. (2009)*, *Rutqvist & Moridis (2008)*, *Rutqvist & Tsang (2003)*. Aufgrund der wissenschaftlichen Ausrichtung der Abteilung ist der – wenngleich beidseitig gekoppelte – TOUGH-FLAC-Simulator dabei bis dato vom Standpunkt der Geohydraulik aus betrachtet und programmiert worden, d.h. mit Fokus auf TOUGH2 und mit FLAC^{3D} primär in der Rolle des zuarbeitenden geomechanischen Simulators für die Berücksichtigung von M→H-Einflüssen. Für die am LfD&G primär fokussierte



Analyse von geomechanischen Prozessen mit sich deformierenden Modellgeometrien und eigenen Stoffmodellen hat sich eine Simulatorkopplung ausgehend von FLAC^{3D} jedoch als sinnvoller ergeben als die Anschaffung des TOUGH-FLAC-Simulators. Gleichwohl haben sich die Erfahrungen des LBNL auf dem Gebiet der Simulatorkopplung und insbesondere natürlich mit TOUGH2 als sehr hilfreich für die Simulatorentwicklung beim LfD&G erwiesen.

Alle TOUGH2-Berechnungen im Rahmen dieses Vorhabens sind mit der Version 2.0 durchgeführt worden. Die in diesem Bericht angegebenen Informationen über TOUGH2 und seine Funktionsweise stammen, wenn nicht anders angegeben, aus dem Benutzerhandbuch *Pruess et al. (1999/2012)*, aus *Rutqvist et al. (2002)* sowie aus dem Fortran-Quellcode von TOUGH2.

6.2 Entwicklung einer Schnittstelle zwischen den Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2

6.2.1 Herangehensweise und Grundstrukturen

Der Quellcode des kommerziellen Simulators FLAC^{3D} ist nicht öffentlich zugänglich und kann somit nicht vom Benutzer modifiziert werden. Für die Datenkommunikation mit anderen Programmen existieren jedoch theoretisch zwei Schnittstellen:

- Für den Simulator FLAC^{3D} können benutzerdefinierte Stoffmodelle in C++ implementiert werden. Dabei besteht die Möglichkeit, über Standard-C++-Befehle Parameter und Zustandsdaten des Modells in externe Dateien zu schreiben sowie aktualisierte Zustandsdaten aus externen Dateien wieder einzulesen. Der Vorteil dieser Option wäre die Verwendung einer weniger hohen (d.h. weniger abstrahierten, maschinennäheren) Programmiersprache und damit scheinbar ein Geschwindigkeitsvorteil. Die alleinige Verwendung dieser C++-Schnittstelle erscheint jedoch impraktikabel in Bezug auf die Kopplung mit einem weiteren Simulationsprogramm aufgrund der Tatsache, dass eine solche umfangreiche Datenkommunikation inklusive Aufruf des weiteren Programms automatisch mit jedem Balancierungs-Iterationsschritt in FLAC^{3D} und für jede Zone separat und mehrfach geschehen würde.
- Im Simulator FLAC^{3D} ist die Programmiersprache FISH integriert, mit der ebenfalls Schreib- und Lesevorgänge in bzw. aus Textdateien möglich sind. Zwar ist FISH damit eine höhere Programmiersprache mit einer langsameren Ausführungsgeschwindigkeit als C++, jedoch würde eine Implementierung der Softwarekopplung in C++ nicht ohne



zusätzliche Funktionen in FISH machbar sein (THM-Kopplungsfunktionen in C++, Simulatorkommunikation in FISH), was den Geschwindigkeitsvorteil von C++ möglicherweise relativiert. Darüber hinaus ist es praktikabler auch im Hinblick auf die Weiterentwicklung des gekoppelten Simulators, sich auf nur eine Programmiersprache zu beschränken.

Der Quellcode des nichtkommerziellen Simulators TOUGH2 ist in der Programmiersprache Fortran verfasst und kann bei der herstellenden Forschungseinrichtung LBNL käuflich erworben werden. Damit sind benutzerseitige Modifikationen am TOUGH2-Quellcode möglich. Im Rahmen der in diesem Forschungsvorhaben erarbeiteten Softwarekopplung sind allerdings im Vergleich zur Programmierarbeit mit FISH nur geringfügige Adaptionen des TOUGH2-Quellcodes erforderlich gewesen.

Eine Grundidee für den FTK-Simulator ist die Verwendung des geomechanischen Simulators FLAC^{3D} als zentraler Bestandteil gewesen, aus dem heraus die thermohydraulischen Simulationen mit TOUGH2 gesteuert werden. Eine Kopplung der beiden Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2 kann nur sequenziell erfolgen, d.h. die geomechanische und die thermohydraulische Teilsimulation finden im Wechsel miteinander statt. Insbesondere bleibt dabei nach jedem mechanischen bzw. thermohydraulischen Berechnungsschritt ein Verfahrensfehler, also eine verfahrensbedingte Diskrepanz zur exakten Lösung des Differenzialgleichungssystems, bestehen, der aber idealerweise im Verlauf der Zeit gegen 0 konvergiert. Der gemeinsame Zeitschritt für die beiden Teilsimulationen und damit die Kopplungsfrequenz (Kehrwert des Zeitschrittes, d.h. Häufigkeit der TOUGH2-Aufrufe aus FLAC^{3D} pro simulierter Zeit) ist geeignet zu bestimmen. Je höher die Kopplungsfrequenz ist, desto geringer wird zwar der Verfahrensfehler gehalten, desto größer kann aber auch der Einfluss von sich akkumulierenden Rundungsfehlern werden und desto länger ist auch die Dauer der gekoppelten Simulation. Hingegen verfälschen zu große Zeitschritte das Berechnungsergebnis insbesondere hinsichtlich des zeitlichen Verlaufs der hydromechanischen Größen und können überdies zu numerischer Divergenz des gekoppelten Simulators führen. Näheres zur Kopplungsfrequenz ist in Abschnitt 6.2.4 zu finden.

Im Sinne der Verwendung von FLAC^{3D} als zentraler Bestandteil des FTK-Simulators wurde bei der Programmierung grundsätzlich auch das Ziel verfolgt, die durch TOUGH2 zusätzlich erforderlichen Modellierungseingaben für den FLAC^{3D}-Benutzer auf möglichst „FLAC^{3D}-artige“ Weise zu realisieren und auf diese Weise von TOUGH2 zu abstrahieren. Das für eine



FTK-Simulation zu erstellende Anwenderprogramm wird daher wie im Fall einer ungekoppelten FLAC^{3D}-Simulation mit FLAC^{3D}-Kommandos und FISH-Funktionen verfasst; die für die Prozess- und Simulatorkopplung erforderlichen Initialisierungen und Vorgänge sind dementsprechend ebenfalls über FISH-Variablen und FISH-Funktionen realisiert worden („FTK-Variablen“ und „FTK-Funktionen“). An manchen Stellen, an denen vom Benutzer potenziell größere Datenmengen einzugeben sind, erschien es dabei jedoch praktikabler, diese Eingaben über zusätzliche externe Textdateien in einem eigenen Format zu realisieren, um die Übersichtlichkeit für den Benutzer zu verbessern. Sowohl für das Anwenderprogramm wie auch für die externen Textdateien stehen dem Benutzer Musterdateien zur Verfügung.

Die FTK-Funktionen können wie folgt kategorisiert werden:

(1) Initialisierungsfunktionen:

Diese FTK-Funktionen umfassen Funktionen zur benutzerfreundlichen Eingabe oder Berechnung von für TOUGH2 relevanten Eingangsdaten in FLAC^{3D} wie thermohydraulische Materialparameter für jeden Gebirgsbereich, Relativpermeabilitäts- und Kapillardruckfunktionen (jeweils Typ und Parameter) oder Porendrücke und *Biot*-Moduli der fluiden Phasen.

(2) Exportfunktionen:

TOUGH2 bezieht seine Eingangsdaten aus einer Textdatei; der Übersichtlichkeit halber können dabei große Datenblöcke wie z.B. Diskretisierungsinformationen auch in separaten Dateien ausgelagert für TOUGH2 bereitgestellt werden. Die sich auf diese Weise ergebenden vier Eingabedateien MESH, GENER, EINGABE und INCON sind allesamt durch die FTK-Funktionen aus FISH heraus zu erstellen und mit entsprechenden FLAC^{3D}-Eingabedaten des Benutzers – inklusive der Daten aus den Initialisierungsfunktionen – zu füllen. Insbesondere sind dabei Daten aus Datenstrukturen, die sich in FLAC^{3D} und TOUGH2 voneinander unterscheiden, geeignet zu transformieren, wie beispielsweise thermohydraulische *Dirichlet*-Randbedingungen (Fixierung von Porendruck oder Temperatur), auf den aktuellen Zeitschritt zugeschnittene veränderliche Quellstärken oder eine zweite Diskretisierung desselben Modells mit *Voronoi*-Struktur. Näheres zu diesem Thema folgt in Abschnitt 6.2.2, „Modellkonversion“.

Anmerkung zu den deutschnamigen, vom LfD&G eingeführten Dateien EINGABE und AUSGABE: TOUGH2 benutzt an dieser Stelle üblicherweise die flexiblere Standardein-

und -ausgabe anstelle von Dateien mit festgelegten Namen, was im Rahmen des Programmaufrufs aus FLAC^{3D} heraus allerdings nicht übernehmbar war.

(3) TOUGH2-Aufruf-/Analysefunktionen:

Diese Kategorie beinhaltet zwei Funktionen, die den Simulator TOUGH2 aufrufen, dessen Ausgabedateien kontrollieren, ggf. eine Rückmeldung ausgeben, falls TOUGH2 aufgrund von Eingabefehlern des Benutzers keine Endzustandsdaten für den Simulationszeitabschnitt geliefert hat, sowie den Berechnungsverlauf auf Zeitschritte ohne numerische thermohydraulische Zustandsänderung überprüfen und entsprechend weiterverfahren (Übergehen, Zeitschrittadaption, Annahme-oder-verwerf-Strategie). Näheres zu der Zeitsteuerung ist im Abschnitt 6.2.4 zu finden.

(4) Importfunktionen:

Analog zu den Exportfunktionen besteht der Zweck der Importfunktionen im Einlesen der Ausgabedateien von TOUGH2, namentlich AUSGABE, SAVE, FOFT und COFT, für die Analyse des Berechnungsverlaufs (siehe Punkt (3)) sowie in der Aktualisierung der thermohydraulischen Zustandsparameter für den folgenden FLAC^{3D}-Berechnungsschritt. Auch beim Datenimport sind vereinzelte Datenumrechnungen in Prozessgrößen, die nicht direkt von TOUGH2 mitausgegeben werden, notwendig.

(5) M→H-Kopplungsfunktion:

Bei einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnung nur mit FLAC^{3D} (Einphasenfluss) wird eine Kopplungsgleichung verwendet, die die mechanische Volumenverzerung ε_{vol} mit der Änderung der hydraulischen Parameter p_l und S_l verknüpft. Aufgrund der für die Softwarekopplung erforderlichen Umstellung der Porendruckdarstellung von einer Knotenvariable in eine Zonenvariable wird diese Kopplungsgleichung in FLAC^{3D} automatisch deaktiviert, so dass sie manuell nachzuimplementieren gewesen ist. Dabei ist nun generell, d.h. auch für den Einphasenfluss, die in TOUGH2 detailliertere Aufschlüsselung des Porendrucks in Porenflüssigkeits-, Porengas- und Kapillardruck zu berücksichtigen gewesen. Für den Zweiphasenfluss musste die Kopplungsgleichung zudem zu einem nichtlinearen Gleichungssystem verallgemeinert werden. In Abschnitt 6.2.3 sind die auf diese Weise modifizierten Kopplungsgleichungen zusammengestellt. Außer im Fall der vollständigen Wassersättigung beim Einphasenfluss münden alle in diesem Absatz erwähnten M→H-Kopplungsansätze in eine nichtlineare Gleichung, für die dann schließlich numerische Lösungsverfahren zu implementieren gewesen sind.



(6) Hilfsfunktionen:

Die vorangehenden FTK-Funktionen bedienen sich vielerlei informatischer, physikalischer oder mathematischer Hilfsfunktionen, beispielsweise zur Transformation einer Fließkommazahl in eine Zeichenkette, die diese Zahl im von TOUGH2 bzw. Fortran geforderten Format und in bestmöglicher Genauigkeit enthält, oder zur Berechnung weiterer Zustandsvariablen aus den bekannten Zahlenwerten für p_g , S_g und T . Im Rahmen der unter Punkt (2) genannten Datentransformation ist es zudem sehr hilfreich, einige modellabhängige Eingabedaten in FLAC^{3D} wie *Dirichlet*-Randbedingungen oder Quellterme bereits für TOUGH2 transformiert vorliegen zu haben, um den Exportvorgang zu beschleunigen. Dieser Sammelprozess geschieht mithilfe des Konzeptes der „verketteten Listen“, die von FISH unterstützt werden (Bereitstellung eines Arbeitsspeicherbereiches für einen Datensatz, der die Speicheradresse eines weiteren Bereiches für den nächsten Datensatz enthält etc.), und entsprechende Arbeitsfunktionen sowie Sammel- und Modifikationsfunktionen für die verschiedenen Listen sind ebenfalls Teil dieser Kategorie.

Auf der Seite von TOUGH2 ist nach dem Nachtrag der herstellerseitigen Fehlerkorrekturen (Bugfixes) zunächst die Umleitung der Ein- und Ausgabe auf Textdateien vorzunehmen gewesen. Um ferner Stoffmassen- oder Wärmeenergietransporte über eine Grenzlinie im geometrischen Modell, wie beispielsweise eine Streckenkontur, nachvollziehen und bilanzieren zu können, wurde die TOUGH2-Ausgabe der Zeitreihen von Zonenverbindungsdaten um eine zeitliche und auch eine örtliche Aufsummierung der über die einzelnen Verbindungen bewegten Stoffmassen ergänzt. Weitere Modifikationen umfassen die Implementierung der Kapillardruck- und Relativpermeabilitätsfunktionen nach (*Burdine*)/*Brooks/Corey* und (*Mualem*)/*van Genuchten* entsprechend Abschnitt 5.2.3.2 und ohne die Voreinstellungen $\lambda = 2$ und $\varepsilon = 1/2$ sowie die Generalisierung der in Gleichung (5.34) genannten Flüssigkeits-Relativpermeabilitätsfunktion nach *Grant*, $K_{rel;l} = S_{l;eff}^4$, auf die allgemeinere Potenzfunktion

$$K_{rel;l} = A \cdot S_{l;eff}^\lambda \quad (\text{damit } K_{rel;g} = A - K_{rel;l}), \quad (6.1)$$

welche in Abschnitt 7 für die Vergleichssimulation des DM-B-Experiments im URL Mont Terri mit der GRS Braunschweig erforderlich gewesen ist (\rightarrow Funktion nach *Irmay (1954)*: mit $A=1$ und $\lambda=3$).

Sowohl FLAC^{3D} wie auch TOUGH2 stellen unterschiedliche Anforderungen an die Diskretisierung des Berechnungsmodells, auf die näher in Abschnitt 6.2.2 eingegangen wird. Die An-



forderungen der beiden Programme sind nicht auf einfache Weise miteinander vereinbar, so dass eine FLAC^{3D}-konforme Diskretisierung in der Regel TOUGH2-inkonform ist und umgekehrt. Grundlegende Untersuchungen zum Einfluss dieser Diskretisierungsinkompatibilität auf das Berechnungsergebnis sind in *Navarro & Seher (2011)* durchgeführt worden, und auch an einem im Rahmen dieses Forschungsvorhabens erstellten 2D-Berechnungsmodell ist eine Einschätzung des aus der Inkompatibilität resultierenden zahlenmäßigen Fehlers vorgenommen worden, deren Ergebnisse in Abschnitt 6.4.3.5 zu finden sind. Erste Versuche zur Behebung dieser Fehlerquelle sind überdies unternommen worden, u.a. dadurch, dass die in FLAC^{3D} erstellte Modelldiskretisierung vorab vom Benutzer mithilfe des am LBNL erhältlichen Programms *Voro++ (Rycroft, 2009)* in eine TOUGH2-konforme Paralleldiskretisierung mit *Voronoi*-Struktur transformiert wird.

6.2.2 Modellkonversion

TOUGH2 bezieht seine Eingangsdaten aus verschiedenen Textdateien, die in FLAC^{3D} über FTK-Exportfunktionen erstellt und mit Inhalt gefüllt werden:

– MESH:

Diese Datei enthält die Modellzonen und die Verbindungen zwischen den Zonen samt den für den TOUGH2-Lösungsalgorithmus benötigten Informationen wie z.B. Zonenvolumina und Distanzen zwischen Stützpunkten und Grenzflächen. Die Daten stammen aus der vom Benutzer in FLAC^{3D} erstellten Modelldiskretisierung bzw. ggf. aus der mit dem Programm *Voro++* transformierten *Voronoi*-Paralleldiskretisierung. Mehr zu den Eigenarten, die bei der Diskretisierungserstellung und -transformation zu beachten sind, ist nach dieser Auflistung zu finden.

– GENER:

Hydraulische und thermische Quellen mit Informationen wie zugehöriger Modellzone, Fluidform und Stützpunkte für einen zeitlichen Produktionsratenverlauf, die vom Benutzer zuvor in einer externen Datei zusammengestellt worden sind, werden hierüber auf das Modell aufgebracht. Dabei kann der Verlauf der Produktionsraten wahlweise stückweise konstant (Treppenfunktion) oder stückweise linear (Polygonzug) angegeben werden. Die TOUGH2-Berechnung für das aktuell zu simulierende Zeitintervall $[t; t + \Delta t]$ wird zur Vermeidung von Rundungsfehlern für den Anfangs- und den End-



zeitpunkt das Intervall $[0; \Delta t]$ übergeben bekommen. Die für den Export zuständigen FTK-Funktionen müssen also zunächst aus den für die gesamte Simulation zusammengestellten Quellen diejenigen heraussuchen, die für das aktuelle Zeitintervall benötigt werden, ihre Zeitangaben transformieren sowie ggf. aus einem stückweise linearen Produktionsratenverlauf den benötigten Ausschnitt herausrechnen.

– EINGABE (Datei für die Standardeingabe):

In dieser Datei befinden sich diverse Daten über Simulationseinstellungen und Materialeigenschaften, die zumeist direkt aus den Zahlenwerten von vom Benutzer in FLAC^{3D} gesetzten FTK-Variablen übernommen werden können. Für hydraulische und thermische Randbedingungen, die in TOUGH2 mithilfe von zusätzlichen Zonen realisiert werden (siehe unten), werden derzeit aufgrund der ursprünglich im TOUGH2-Quellcode fixierten Maximalzahl von Materialgruppen zusätzliche, universelle Pseudo-Materialgruppen mit z.T. benutzerdefinierten Parametern entsprechend den Anforderungen im Modell erstellt und übergeben. Auch Zeitreihenpositionen für thermohydraulische Größen, die der Benutzer in externen Textdateien angibt, werden hier an TOUGH2 übertragen.

– INCON:

Für den anstehenden thermohydraulischen Simulationsteil werden die im FLAC^{3D}-Modell auf alle Zonen aufgebrachten bzw. im weiteren Simulationsverlauf neu berechneten Zahlenwerte der primären Zustandsvariablen in TOUGH2 – in der Regel Porengasdruck, Gassättigung und Temperatur – sowie die Porosität als Anfangswerte in diese Datei geschrieben. Im Fall der Zustandscharakterisierung in TOUGH2 durch wechselnde Primärvariablen beim Übergang vom einphasigen in den zweiphasigen Zustand oder umgekehrt (Zweiphasenfluss: entweder Gassättigung oder Luftmassenanteil; Einphasenfluss: entweder Porenwasserdruck oder Wassersättigung) ist festzustellen, welcher Zustand nach Ablauf des geomechanischen Simulationsteils vorliegt, um die korrekte Zustandsvariable zu übergeben.

Modelldiskretisierung und Voronoi-Struktur

Modellzonen werden in den beiden verwendeten Simulatoren auf unterschiedliche Weise realisiert: Während in FLAC^{3D} die genauen Geometrien der Zonen und ihrer Eckpunkte (Kno-

tenpunkte) sowie Zonnachbarschaften durch die Modellerstellung vorgegeben werden, sind für eine Diskretisierung in TOUGH2 die geometrischen Daten jeder Zone – Stützpunkte, Volumina, Grenzflächeninhalte, Verbindungslinien zu Grenzflächen zu Nachbarzonen inkl. Teufenunterschieden – einzeln und programmiertechnisch unabhängig voneinander anzugeben. Die Zonenrealisierung in TOUGH2 ist somit abstrakter als in $FLAC^{3D}$, und es ist auf diese Weise auch theoretisch möglich, geometrisch irrationale Diskretisierungen zu erstellen. In Bezug auf Randbedingungen sind vereinzelt sogar derartige irrationale Zonenabmessungen vorgesehen, worauf weiter unten näher eingegangen wird. Allgemein können durch irrationale Geometrien allerdings auch physikalisch irrationale Effekte wie z.B. Perpetua Mobilia – Wasser strömt erdanziehungsgetrieben durch mehrere Zonen nach unten und kommt schließlich in der obersten Zone wieder an – entstehen. Die FTK-Funktionen für den Datenexport verwenden als primäre Option die aus der $FLAC^{3D}$ -Diskretisierung erhaltenen bzw. über Hilfsfunktionen daraus berechneten Geometriedaten und geben diese an TOUGH2 weiter, so dass der Modellbereich auch in TOUGH2 rational diskretisiert ist. Als Stützpunkte für die TOUGH2-Diskretisierung werden dabei die von $FLAC^{3D}$ automatisch berechneten Schwerpunkte (Zentroide) jeder Zone übergeben, Bild 6.1.

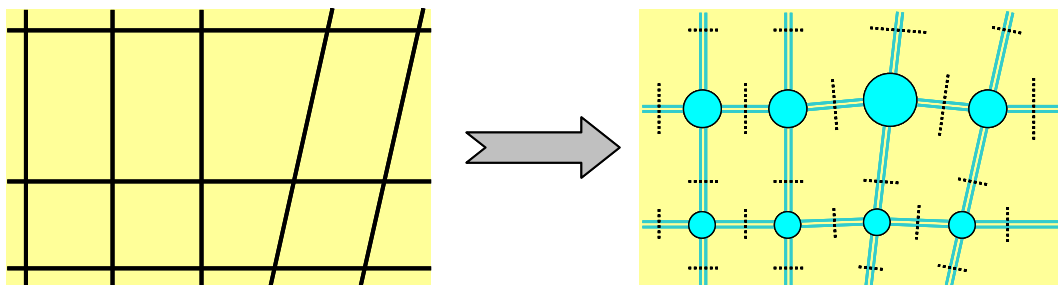


Bild 6.1: Konversion der Modelldiskretisierung von $FLAC^{3D}$ für TOUGH2 (Schema): Übernahme der Zonenschwerpunkte und -volumina (Positionen und Größen der Kreise) sowie der Verbindungen mit Zonengrenzen und ihren Flächeninhalten (Positionen und Längen der gepunkteten Linien) aus $FLAC^{3D}$

Generell und unabhängig vom eingesetzten Simulator ist bei der physikalisch-mathematischen Modellierung bekanntermaßen eine Diskretisierung zu wählen, die den modellierten Prozessen gerecht wird (z.B. eine feinere Diskretisierung von Modellbereichen, an denen im Simulationsverlauf höhere Gradienten erwartet werden; gleiche Orientierung von Diskretisierung und bevorzugter hydraulischer/thermischer Strömungsrichtung). Bedingt durch die unterschiedlichen numerischen Lösungsverfahren, mit denen $FLAC^{3D}$ und TOUGH2 arbeiten, und im Fall von $FLAC^{3D}$ auch durch den daraus entstandenen Präprozessor stellen diese bei-



den Simulatoren aber auch überdies programmtechnisch unterschiedliche Anforderungen an die Diskretisierung des Berechnungsmodells:

- $FLAC^{3D}$ bietet im Rahmen seines eigenen Präprozessors fünf Zonengrundformen („basic primitive mesh shapes“) zur Modellerstellung an. Für den Benutzer besteht keine Möglichkeit, weitere Grundformen hinzuzufügen, d.h. Diskretisierungen für physikalische Modelle, die in $FLAC^{3D}$ simuliert werden sollen, müssen zwingend aus diesen Grundformen aufgebaut sein. Darüber hinaus bestehen keine herstellerseitigen Restriktionen an $FLAC^{3D}$ -Diskretisierungen.
- Das numerische Verfahren in TOUGH2 erfordert, dass jede Grenzfläche zwischen zwei Modellzonen senkrecht zur Verbindungslinie der beiden zugehörigen zonalen Stützpunkte orientiert ist (Fläche und Linie müssen sich dabei nicht zwangsläufig schneiden), *Pruess (2004)*. Um eine Modelldiskretisierung zu erhalten, die dieser Orthogonalitätsbedingung von TOUGH2 genügt, wird oftmals eine Diskretisierung mit einer so genannten *Voronoi*-Struktur erstellt: Jede Zonengrenzfläche befindet sich stets genau mittig zwischen den Stützpunkten der beiden zugehörigen Zonen. Die Orthogonalität zwischen Grenzfläche und Verbindungslinie resultiert dann aus dieser Definition, wobei die mittige Position der Grenzfläche selbst eigentlich keine Anforderung von TOUGH2 ist. Wenn die Modellberandung nicht zu ungünstig geformt ist, ergibt sich die *Voronoi*-Modelldiskretisierung eindeutig aus der Verteilung der Stützpunkte, und ihre Zonen können dabei beliebige konvexe polyedrische Formen annehmen.

Aus diesen unterschiedlichen Diskretisierungsanforderungen der beiden Simulatoren ergibt sich eine generelle Inkompatibilität von $FLAC^{3D}$ - und TOUGH2-Diskretisierungen, d.h. dass Modelldiskretisierungen, die für einen der beiden Simulatoren geeignet sind, für den anderen per se – abgesehen von Randfällen – nicht geeignet sind. Zonen einer TOUGH2-konformen Diskretisierung können jede beliebige konvexe polyedrische Form annehmen und sind damit in der Regel nicht mehr durch $FLAC^{3D}$ -Zonengrundformen darstellbar. Verbindungslinien zwischen Zentroiden aus einer $FLAC^{3D}$ -Diskretisierung schneiden die entsprechende Zonengrenzfläche (bzw. die durch sie bestimmte Ebene) im allgemeinen weder mittig noch orthogonal. Auch ist es generell nicht möglich, in eine $FLAC^{3D}$ -Diskretisierung zusätzlich zu den Zentroiden einen Parallelsatz von Stützpunkten derart zu legen, dass aus ihnen eine *Voronoi*-Diskretisierung oder auch nur eine die TOUGH2-Orthogonalitätsanforderung erfüllende Diskretisierung entsteht, deren Zonengrenzflächen denen der $FLAC^{3D}$ -Diskretisierung entspre-

chen. Das im Zusammenhang mit Bild 6.1 beschriebene Vorgehen bei der Modellkonversion produziert somit eine für das Lösungsverfahren in TOUGH2 inkonforme Modelldiskretisierung. Es ist daher zu erwarten, dass dieser Eingangsfehler numerische Fehler bei der TH-Strömungsberechnung in TOUGH2 nach sich zieht, wobei die Hoffnung besteht, dass geringfügige Verletzungen der Orthogonalitätsbedingung bzw. der *Voronoi*-Struktur auch nur geringe numerische Fehler bei der Strömungsberechnung zur Folge haben. Diskretisierungen von Gebirgsbereichen haben oftmals tendenziell im Nahfeld eines Hohlraumes aufgrund ihrer Feinheit und ggf. rundlicheren Konturen eine eher regelmäßige Struktur als in Richtung der äußeren Modellränder oder Schichtgrenzen, so dass die dortigen Zonen augenscheinlich nur geringe Asymmetrien oder Abmessungsunterschiede aufweisen.

Zur Behebung der Diskretisierungsincompatibilität zwischen $FLAC^{3D}$ und TOUGH2 sind verschiedene Ansätze überlegt und z.T. auch in den FTK-Simulator implementiert worden:

- (1) Jede $FLAC^{3D}$ -Zonengrenzfläche wird bei der Konversion „orthogonal aufgerichtet“, indem ihr Flächeninhalt mit einem Korrekturfaktor ≤ 1 , der sich aus ihrem Schiefstand bezüglich der zugehörigen Zonenverbindungsline ergibt, multipliziert. Dieser Ansatz hat jedoch nur Näherungscharakter, da mit dieser Winkelkorrektur kein geometrisch zusammenhängendes und konsistentes Grenzflächennetz mehr verbunden ist. Eine signifikante Verbesserung von Berechnungsergebnissen konnte mit diesem Ansatz auch nicht erreicht werden.
- (2) Im Hinblick auf zweidimensionale Berechnungsmodelle sind erste Überlegungen angestellt und erste Programmierversuche unternommen worden, einen Algorithmus zu implementieren, mit dem in $FLAC^{3D}$ eine aus Dreiecks- und Viereckselementen (Dreiecksprismen bzw. Hexaedern) bestehende *Voronoi*-Diskretisierung mit parallelem Stützpunktesatz unter vorgegebenen geometrischen Randbedingungen erstellt werden kann. Die Entwicklungszeit für diesen Diskretisierungsalgorithmus ist dabei allerdings selbst für den 2D-Fall unterschätzt worden, so dass einem dritten, schneller zu realisierenden und weniger eingeschränkten Ansatz der Vorzug gegeben worden ist. Hinzu kommt, dass dieser zweite Ansatz nicht für Simulationen mit größeren Deformationen geeignet ist, da hier im Gegensatz zu den anderen beiden Ansätzen keine die TOUGH2-Anforderungen wiederherstellenden Korrekturen an der Diskretisierung erfolgen können. Gleichwohl birgt dieser Ansatz Entwicklungspotenzial.



- (3) Aus den Zentroiden der FLAC^{3D}-Modelldiskretisierung wird vor dem eigentlichen Berechnungslauf mithilfe des Programms Voro++ (Rycroft, 2009) eine *Voronoi*-Diskretisierung erstellt, die von TOUGH2 anstelle der ursprünglichen Diskretisierung verwendet wird. Hierbei ist aufgrund der Inkonsistenz der zwei parallel verwendeten Diskretisierungen erneut mit Verfahrensfehlern zu rechnen. Der FTK-Simulator verfügt über eine zweite Option zum Modelldatenexport, mit der eine auf die beschriebene Weise zuvor erzeugte *Voronoi*-Diskretisierung an TOUGH2 übergeben wird. Um die Diskretisierungsinkonsistenz zumindest hinsichtlich der Gesamtvolumina von Materialbereichen zu reduzieren wird empfohlen, Materialbereichsübergänge in FLAC^{3D} beidseitig mit schmalen, quasi gleichförmigen Zonen zu gestalten, damit nahe der Übergänge einander gegenüberliegende Zentroide/TOUGH2-Stützpunkte entstehen, deren TOUGH2-Grenzflächen sich in guter Näherung mit den entsprechenden FLAC^{3D}-Grenzflächen decken (d.h. die Materialbereichsübergänge bleiben näherungsweise erhalten).

Systematische quantitative Analysen der Effizienz anhand von exakten Lösungen (analytischen Formeln oder Vergleichsberechnungen mit anderen Simulatoren) stehen bei den drei Ansätzen allerdings noch aus.

Anisotrope Strömungsprozesse

Eine weitere Schwierigkeit bei der Modellerstellung in TOUGH2 und infolgedessen der Konversion der FLAC^{3D}-Diskretisierung stellt das im Wirtsgestein Tonstein generell anzutreffende Schichtungsflächengefüge und die daraus resultierende Anisotropie in den hydraulischen Transporteigenschaften (Permeabilitäten bzw. Mobilitäten) der Gesteinsbereiche dar. Zwar ist es möglich, in TOUGH2 drei verschiedene Zahlenwerte $K_1; K_2; K_3$ pro Materialbereich für die Permeabilität anzugeben, die dort mit drei unterschiedlichen (Haupt-)Strömungsrichtungen assoziiert werden, allerdings muss jeder Zonenverbindung in der Diskretisierung exakt einer dieser drei Permeabilitätswerte zugewiesen werden. Für Berechnungsmodelle, bei denen die Diskretisierung auf dieselbe Weise orientiert ist wie die Hauptströmungsrichtungen, wäre somit eine hydraulisch anisotrope Berechnung mit TOUGH2 durchführbar. Jedoch stellt eine derartig starre Diskretisierung gerade in Verbindung mit geomechanischen Prozessen wie z.B. der Spannungsübertragung an gekrümmten Konturen von Einlagerungstrecken zumeist eine unzulässige oder ungünstige Vereinfachung des Modells dar. Ein Lösungsansatz könnte durch die Implementierung eines symmetrischen Permeabilitätstensors K nach dem Vorbild von

FLAC^{3D} erhalten werden: Für die normierte, dimensionslose Richtung v des Druckgradienten beschreibt der Vektor $K_v := K v$ die intrinsische Permeabilität in der Richtung des durch diesen Gradienten induzierten hydraulischen Flusses. Bedingt durch die Materialanisotropie müssen die Richtungen von Fluidfluss und Druckgradient dabei nicht zwingend übereinstimmen. Der genaue Zusammenhang zwischen Druckgradient und Fluidfluss kann der für diesen Ansatz aus den Gleichungen (5.12) und (5.13) zusammengestellten *Darcy*-Gleichung (6.2) entnommen werden (der Übersichtlichkeit halber mit $g = 0 \frac{m}{s^2}$ und dem zusammenfassenden skalaren Vorfaktor $a_{\kappa\varphi}$ wiedergegeben):

$$q_{m;\kappa\varphi} = a_{\kappa\varphi} \cdot K \cdot \nabla p_\varphi = a_{\kappa\varphi} \|\nabla p_\varphi\| \cdot K v \quad (6.2)$$

mit

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

$a_{\kappa\varphi} := -\rho_\varphi X_{\kappa\varphi} K_{rel;\varphi}(S_l) / \eta_\varphi$ in $kg/(m^3s \cdot MPa)$,

K intrinsischer Permeabilitätstensor in m^2 ,

p_φ Porendruck in MPa ,

v normierter Richtungsvektor des Druckgradienten, dimensionslos, $v = \nabla p_\varphi / \|\nabla p_\varphi\|$.

Mitarbeiter des LBNL haben einen solchen Permeabilitätstensor-Ansatz für ein hydromechanisches Berechnungsmodell einer Strecke im URL Mont Terri versuchsweise umgesetzt gehabt, jedoch keine zufriedenstellenden Simulationsergebnisse erhalten.

Analog zu einer hydraulischen Anisotropie wäre auch die Implementierung einer thermischen Anisotropie mit unterschiedlichen Wärmeleitfähigkeiten parallel und senkrecht zum Schichtungsflächengefüge denkbar. In TOUGH2 wird die Wärmeleitfähigkeit nach Gleichung (5.9) lediglich skalar angegeben und somit nur ein isotroper Wärmeausbreitungsprozess unterstützt.

Generell besteht bei der diskreten Modellierung von anisotropen Strömungsprozessen die Gefahr, dass durch die Verschmierung des Schichtungsflächengefüges innerhalb der Modellzonen die fluide Schichtungsflächen überspringen und in der Folge in Zonen landen können, in welche sie bei realistischer Betrachtung nicht oder erst nach deutlich längerer Zeit gelangen würden. Das wirksamste Mittel in TOUGH2 gegen solche Übersprungeffekte ist eine schichtungsparallele Diskretisierung des Berechnungsmodells, was möglicherweise ein Grund dafür ist, dass in TOUGH2 kein Permeabilitätstensor implementiert worden ist.



Randbedingungen und Quellen

Bei *Dirichlet*-Randbedingungen werden Prozessgrößen an Modellrändern auf vorgegebene Zahlenwerte gesetzt. In FLAC^{3D} werden solche Randbedingungen auf einfache Weise mithilfe des wiederholten Kommandos `fix` auf einen jeweils im Kommando näher spezifizierten Modellbereich aufgebracht. In TOUGH2 hingegen werden thermohydraulische *Dirichlet*-Randbedingungen an jeder einzelnen Modellzonen-Seitenfläche ihres Geltungsbereiches durch eine zusätzliche Zone realisiert, die mit dem dort vorgegebenen Randwert zu initialisieren ist. Damit die Randwerte auch tatsächlich von der TH-Strömungsberechnung unbeeinflusst bleiben können, existieren zwei Konzepte in TOUGH2: (1) Die Randbedingungs-Zusatzzonen oder kurz Randbedingungs-zonen werden als „inaktiv“ deklariert, d.h. für sie werden keine Erhaltungsgleichungen gelöst, und es werden dort feste Zahlenwerte anstelle von Variablen für die primären Größen verwendet, und (2) den Randbedingungs-zonen werden extrem große Volumina zugewiesen, so dass Zu- und Abströme von Fluidmassen oder Wärmeenergie in den modelltypischen Dimensionen einen vernachlässigbaren Einfluss auf die primären Größen in den Randbedingungs-zonen haben, d.h. sich diese Größen dort rundungsbedingt nicht ändern. Das erste Konzept besitzt den Vorteil, dass keine weiteren, überflüssigen Unbekannten in die numerischen Gleichungen mitaufgenommen werden und sich somit der numerische Lösungsaufwand nur geringfügig im Vergleich zu einer Deklaration mit aktiven Randbedingungs-zonen erhöht. Mit dem zweiten Konzept ist die Aufbringung einer *Dirichlet*-Randbedingung mit zeitlich veränderlichem Zahlenwert möglich (in Verbindung mit einer hydraulischen bzw. thermischen Quelle zur Steuerung des Zahlenwertes), was jedoch im Rahmen der in diesem Forschungsvorhaben betrachteten Berechnungsmodelle bislang nicht erforderlich gewesen ist, so dass für den FTK-Simulator schließlich auf das erste Konzept zurückgegriffen worden ist.

Die thermohydraulischen Eigenschaften der Randbedingungs-zonen können in vielen Fällen identisch zu denjenigen der anliegenden Modellzonen gewählt werden, beispielsweise bei äußeren Modellrändern im Fernfeld eines Endlagersystems. An einigen Stellen kann die physikalische Prozessmodellierung es jedoch erforderlich machen, abweichende Parameter einzusetzen:

- Bei hydraulischen Druckrandbedingungen aufgrund von luftgefüllten Hohlräumen im Gebirge ($S_f = 0\%$) muss sichergestellt werden, dass kein Kapillardruck auftritt, der andernfalls bei einer Übernahme der Kapillardruckfunktion des Gebirgsmaterials $\infty \text{ MPa}$

betragen würde. Eine Möglichkeit zur Umgehung dieser Hürde wäre die Setzung von $S_l = 100\%$, da dies bei vielen gängigen Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen zum gewünschten Ergebnis $p_{cap} = 0 \text{ MPa}$ führen würde. Diese Setzung auf eine Pseudo-Flu-
bedingung birgt allerdings die Gefahr einer Verfälschung von potenziellen saugspannungsinduzierten Fluidströmen vom Hohlraum hinein ins Gebirge.

- Des Weiteren soll zugelassen werden, dass hydraulische und thermische Randbedingungen in Modellen nicht zwangsweise deckungsgleich auftreten, d.h. dass es Modellränder mit nur hydraulischen oder nur thermischen Randbedingungen geben darf. In einem solchen Fall darf die Leitfähigkeit des Gebirges für den Prozess, der am entsprechenden Rand nicht stattfinden soll, nicht übernommen werden, sondern muss auf 0 (m^2 bzw. $W/(m \cdot K)$) gesetzt werden. Vereinfachte orientierende Simulationen von Szenarien mit luftgefüllten Hohlräumen (Druckrandbedingung, aber vernachlässigte Wärmeableitung in den Hohlraum) oder Erhitzern bzw. Abfallbehältern (Temperaturrandbedingung, aber keine Fluidströme in die Wärmequelle) sind als Anwendung für diese Art von Randbedingungen vorstellbar.

Eine für den FTK-Simulator mögliche Realisierung der – im Hinblick auf die Modellierung komplexerer Geosysteme – potenziellen Vielzahl an unterschiedlichen Ausprägungen von *Dirichlet*-Randbedingungen wäre die Definition eigener Materialgruppen für jede auftretende Ausprägung. Da die maximal verwendbare Anzahl an Materialgruppen im ursprünglichen Fortran-Quellcode von TOUGH2 jedoch fest eingestellt ist, erschien es zum Zeitpunkt der Implementierung der FTK-Funktionen sinnvoller, lediglich drei universelle Randbedingungs- (Pseudo-)Materialgruppen für die möglichen Prozesskombinationen H, T und TH mit entsprechend auf benutzerdefinierte Zahlenwerte oder auf 0 gesetzten Leitfähigkeiten einzuführen. Die Kapillardrücke für diese Materialgruppen werden auf 0 MPa festgesetzt, was erstens den Hohlraumbedingungen gerecht wird, zweitens aber auch keinen Widerspruch im in der Regel wassergesättigten Felsgestein des Fernfelds erzeugt. Ferner wird eine vom Benutzer mit Blick auf einen im Modell enthaltenen Hohlraumrand hoch angesetzte hydraulische Permeabilität für H- oder TH-Randbedingungen keine signifikanten Verfälschungen der Prozesse im Fernfeld nach sich ziehen, sofern vom Benutzer in TOUGH2 eine harmonische Mittelung bei unterschiedlichen Permeabilitäten zweier benachbarter Zonen eingestellt worden ist (bei einer harmonischen Mittelung, d.h. einer Mittelung über die Kehrwerte, fallen geringere Zahlenwerte stärker ins Gewicht als höhere Zahlenwerte).



Mittels FTK-Hilfsfunktionen sind nun also die benutzerseitig in FLAC^{3D} festgelegten Randbedingungen zu sammeln und nach Prozessen zu differenzieren. Beim Datenexport für TOUGH2 werden dann die erforderlichen Informationen über die Randwerte, die Geometrie und die universellen Materialgruppen für die Randbedingungenzonen gemäß den oben beschriebenen Ansätzen und Voreinstellungen zusätzlich zu den entsprechenden Daten für das Berechnungsmodell selbst in die TOUGH2-Eingangsdateien INCON, MESH und EINGABE geschrieben.

Bei *Neumann*-Randbedingungen werden räumliche Normalableitungen für Prozessgrößen auf Modellrändern auf vorgegebene Zahlenwerte gesetzt (vgl. Abschnitt 5.4, Modellbeispiel (3): $p'_i(t; -20m) = 0 \text{ MPa/m}$). Die für die Anwendung eher etwas abstrakteren räumlichen Ableitungen (Gradienten) von Porendrücken und Temperaturen können den Gleichungen (5.12) bzw. (5.9) zufolge mit den hydraulischen und thermischen Strömungsfeldern $q_{m,\kappa\phi}$ bzw. q_E assoziiert werden, so dass die Aufbringung von *Neumann*-Randbedingungen in TOUGH2 direkt über Strömungsquellen, d.h. über die benutzerseitige Angabe von Quellstärken $\hat{q}_{m,\kappa}$ bzw. \hat{q}_E , implementiert ist. Über die zusätzliche Angabe von Enthalpiewerten bei Fluidquellen ist dabei auch ein konvektiver Wärmeenergieaustausch zwischen Quelle und Modell möglich. In FLAC^{3D} bestehen ebenfalls Möglichkeiten zur Aufbringung von gitterpunkt-, seitenflächen- und zonenbezogenen Quellen, jedoch ist zum Zeitpunkt der Implementierung der FTK-Funktionen (FLAC^{3D}-Version 4) ein Zugriff auf diese Quellendaten über FISH-Funktionen und damit ein Export dieser Daten für TOUGH2 nicht möglich gewesen. Die für eine Berechnung mit dem FTK-Simulator erforderlichen Quellendaten wie Komponenten (Wasser, Luft etc.), Modellzonen und Stützpunkte von zeitlichen Quellstärkenverläufen sind somit vom Benutzer über eine externe Textdatei tabellarisch anzugeben. Mit Blick auf eine durch *Rutqvist et al. (2012)* motivierte erweiterte Anwendung des FTK-Simulators auf untertägige Hohlräume für Druckluftspeicher in nichtsalinaren Wirtsgesteinen ist dabei eine wechselweise Auflistung von Ein- und Ausspeiseraten (Quellen und Senken) für dieselbe Modellzone erlaubt. Die für die Übertragung der Quellen und Senken an TOUGH2 zuständigen FTK-Exportfunktionen filtern aus den benutzerseitigen Angaben aus der Textdatei dann die für den aktuellen Zeitschritt gültigen Quellen und Senken heraus und schreiben die zugehörigen Daten in die TOUGH2-Eingabedatei GENER.

Bei Fluidquellen und -senken wird im Fall einer nichtisothermen Modellierung und Simulation auch immer Wärmeenergie in das System mitein- bzw. -ausgetragen. Während die aus



einer Modellzone über eine Fluidsenke ausgetragene Wärmeenergiemenge bzw. -rate in TOUGH2 durch die Temperatur des ausströmenden Fluides, d.h. durch die Temperatur der Zone, automatisch bestimmt wird, sind bei einer Fluidquelle vom Benutzer Zahlenwerte zur Quantifizierung des Wärmeenergieeintrags anzugeben. Anstelle von Temperaturwerten handelt es sich dabei jedoch um Zahlenwerte für die spezifische Enthalpie, so dass für eine Fluidquelle, bei der die Temperatur T_0 des einzuspeisenden Fluides im Modell gegeben ist, zunächst eine Umrechnung dieses Zahlenwertes in einen Enthalpiewert erforderlich wäre. Eine zur Temperaturumrechnung alternativ genutzte Möglichkeit ist die Einführung von aktiven *Neumann*-Randbedingungs-Zusatzzonen, die die Fluidquellen der zugehörigen Modellzonen übertragen bekommen. Jede solche Randbedingungszone wird mit der dort vorgegebenen Fluidtemperatur $T = T_0$ initialisiert und ist mit der zugehörigen Modellzone hydraulisch leitend, aber thermisch isoliert ($\lambda = 0 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$) verbunden, so dass Wärmeenergie nur konvektiv übertragen wird. Der Zustrom aus der Quelle kann in TOUGH2 dann indirekt mit der spezifischen Enthalpie, die der Temperatur T der Randbedingungszone entspricht, erfolgen. Werden die Volumina dieser Randbedingungszone hinreichend klein und die Kontaktflächen zu ihren zugehörigen Modellzonen hinreichend groß gewählt, stellen sie für die Strömungsrechnung auch keine unbeabsichtigten Fluidmassensenken dar. Zu geringe Volumina und zu große Kontaktflächen der Randbedingungszone führen allerdings wiederum zu unerwünschten Nebeneffekten wie erhöhten Berechnungszeiten oder numerischen Instabilitäten.

Aufgrund der beim FTK-Simulator erlaubten wechselweisen Auflistung von Ein- und Auspeiseraten für dieselbe Modellzone ist die Aufbringung von Fluid- und Wärmeenergiequellen und -senken generell über *Neumann*-Randbedingungszone realisiert worden. Die Volumina dieser Randbedingungszone und ihre Kontaktflächen zu ihren zugehörigen Modellzonen werden dabei vom FTK-Simulator individuell in Abhängigkeit der jeweils vorliegenden Quellstärken und weiteren hydraulischen bzw. thermischen Materialparameter berechnet.

Im jüngeren Verlauf der Projektbearbeitungszeit ist beim LfD&G das Verständnis für den TOUGH2-Quellcode und damit auch für Details zur TH-Prozesssimulation mit TOUGH2 gewachsen, so dass sich für die beiden beschriebenen Arten von Randbedingungen alternative Möglichkeiten zur Realisierung im FTK-Simulator anbieten. Die ursprünglich feste Obergrenze für die Anzahl an Materialgruppen in TOUGH2 ist flexibilisiert worden und wie andere Obergrenzen auch vor der Kompilierung einzustellen. Somit ist die Grundlage für die Implementierung eines Konzeptes für *Dirichlet*-Randbedingungen geschaffen worden, das diffe-



renziertere Randbedingungsprägungen im FTK-Simulator zuweisbar macht (z.B. mit nichtverschwindenden Kapillardrücken, um verschiedene Porenwasser- und -gasdruckrandbedingungen bei Teilsättigung zu realisieren). Auch eine Revision des Konzeptes für Quellen erscheint in Anbetracht des aufgrund der *Neumann*-Randbedingungszone erhöhten Berechnungsaufwandes sinnvoll. Hier könnte möglicherweise eine automatische Umrechnung der Temperaturen von einzuspeisenden Fluiden in Zahlenwerte für die spezifische Enthalpie mithilfe von Funktionsvorschriften aus TOUGH2 implementiert werden; die Randbedingungs-Zusatzzone entfielen damit gänzlich.

6.2.3 Implementierung der THM-Kopplungsbeziehungen

Die Kommunikation von Informationen über den thermohydraulischen Zustand einer jeden Modellzone von und nach TOUGH2 findet über die dortigen Porositäten sowie über die primären Zustandsvariablen oder „Primärvariablen“ von TOUGH2 statt, deren Anfangswerte für jede Zone zu Beginn der thermohydraulischen Teilsimulation aus der Eingangsdatei `INCON` eingelesen und deren Endwerte abschließend entsprechend in die Ausgangsdatei `SAVE` geschrieben werden. Die Anzahl der unterschiedlichen primären Zustandsvariablen je Modellzone entspricht der Anzahl der Freiheitsgrade aus den Prozessgleichungen des unterliegenden physikalischen Modells, d.h. diese Variablen charakterisieren den thermohydraulischen Zustand jeder Zone und damit des gesamten Modells eindeutig, und alle anderen thermohydraulischen Größen lassen sich in der Modellvorstellung aus ihnen berechnen („Sekundärvariablen“). In der Regel handelt es sich bei den Primärvariablen um den Porengasdruck, die Gas-sättigung und im Fall einer anisothermen Simulation auch um die Temperatur. Bei Betrachtung von Einphasenflussprozessen mit nur einem Freiheitsgrad werden je nach Phasenzustand (voll- oder teilgesättigt) je Modellzone entweder der Porenwasserdruck oder die Wassersättigung ausgetauscht. An diesen kommunizierten Größen ist die THM-Prozesskopplung idealerweise anzusetzen.

Gemäß Abschnitt 5.3 sind die meisten der THM-Kopplungsbeziehungen bereits intern innerhalb der Simulatoren `FLAC3D` (TH→M) und `TOUGH2` (T↔H) realisiert. Damit ist in dem in diesem Forschungsvorhaben erarbeiteten FTK-Simulator insbesondere noch die M→H-Kopplungsbeziehung nachzuimplementieren gewesen. Dazu ist in Anlehnung an die in `FLAC3D` und `FLAC` verwendeten Kopplungsgleichungen auf die Gleichung (5.43) zurückgegriffen worden, welche als FTK-Funktion implementiert worden ist und somit auch bei Bedarf vom



Benutzer durch erweiterte oder alternative Kopplungsbeziehungen ausgetauscht werden kann. Auch die FLAC^{3D}-internen H→M- und T→M-Kopplungsgleichungen (5.36) bzw. (5.37) können durch Setzung von $\alpha = 0$ bzw. $\alpha_{th} = 0$ deaktiviert und vom Benutzer durch eigene FISH-Funktionen ersetzt werden.

Die Gleichungen, die die hier verwendete M→H-Prozessinteraktion generell beschreiben, sind die zweiphasig formulierte Kopplungsgleichung (5.43) in Verbindung mit den Zusammenhängen der Porendrücke p_g, p_l und der Sättigungen S_g, S_l der beiden auftretenden fluiden Phasen nach den Gleichungen (5.14) bzw. (5.16). Werden diese für das Kontinuum geltenden Gleichungen diskret, also auf eine einzelne Zone des Berechnungsmodells mit dem Volumen V bezogen betrachtet, kann die logarithmische Volumenverzerrung $\varepsilon_{vol} = \varepsilon_{log,vol}^m$ der Zone gemäß Gleichung (5.7a) durch die Veränderung ihres Volumens ausgedrückt werden, woraus $\dot{\varepsilon}_{vol} = -\dot{V}/V$ folgt. Insgesamt ergibt sich also für jede Modellzone:

$$\frac{1}{\tilde{M}_\varphi} \dot{p}_\varphi + \frac{\phi}{S_\varphi} \dot{S}_\varphi = \alpha \dot{\varepsilon}_{vol} = -\frac{\alpha}{V} \dot{V} \quad (6.3a)$$

$$\sum_\varphi S_\varphi = 1 \quad (6.3b)$$

$$p_g = p_l + p_{cap}(S_l) \quad (6.3c)$$

mit

\tilde{M}_φ Biot-Modul in *MPa* (zur Definition siehe Gleichung (5.42)),

p_φ Porenfluiddruck in *MPa*,

ϕ Porosität des Mediums, dimensionslos,

S_φ Sättigung, dimensionslos,

α Biot-Koeffizient, dimensionslos,

ε_{vol} Volumenverzerrung, dimensionslos,

V Volumen der Modellzone in m^3 ,

p_{cap} Kapillardruck in *MPa*, Konvention hier: $p_{cap} \geq 0 \text{ MPa}$.

Die Gleichungen (6.3a-c) bilden ein aus vier Gleichungen bestehendes nichtlineares Gleichungssystem in den vier Unbekannten p_g, p_l, S_g und S_l , von denen nach mathematischen

Umformungen die nichtlineare Gleichung (6.4a) verbleibt und numerisch zu lösen ist. Im weiter unten beschriebenen Spezialfall des Einphasenflusses entfallen dabei aufgrund von veränderten Modellannahmen zwei Gleichungen und zwei Unbekannte.

Durch Integration über ein Zeitintervall Δt bzw. bei instantanen Zustandsänderungen direkt durch den Übergang von Zeitableitungen zu Differenzen $\dot{p}_\varphi \rightarrow \Delta p_\varphi$ und Quotienten $\dot{S}_\varphi/S_\varphi \rightarrow \ln PS_\varphi$, $\dot{V}/V \rightarrow \ln PV$ (mit $\Delta a = a_{neu} - a_{alt}$ und $Pa = a_{neu}/a_{alt}$) sowie durch anschließendes Einsetzen und Subtraktion werden aus den Gleichungen (6.3a-c) die Gleichungen (6.4a/b) erhalten:

$$\begin{aligned} p_{cap}(S_{l,neu}) + \phi(\tilde{M}_g \ln(1 - S_{l,neu}) - \tilde{M}_l \ln S_{l,neu}) \\ = p_{cap}(S_{l,alt}) + \phi(\tilde{M}_g \ln(1 - S_{l,alt}) - \tilde{M}_l \ln S_{l,alt}) + \alpha(\tilde{M}_l - \tilde{M}_g) \ln PV \end{aligned} \quad (6.4a)$$

$$p_{l,neu} = p_{l,alt} - \tilde{M}_l \phi \ln PS_l - \alpha \tilde{M}_l \ln PV \quad (6.4b)$$

Zur iterativ-numerischen Lösung der Gleichung (6.4a) nach der Unbekannten $S_{l,neu}$ ist das *Newton*-Verfahren in den FTK-Simulator implementiert worden. Für Zahlenwerte von $S_{l,alt} \approx 1$ in einer Modellzone, die im folgenden mechanischen Rechenschritt kompaktiert wird, kann das Iterationsverfahren jedoch aufgrund des für eine potenzielle Iterierte $S_{l,i} \geq 1$ nicht definierten Terms $\ln(1 - S_{l,i})$ abbrechen, so dass ein abgewandeltes Lösungsverfahren für solche Fälle hinzuzufügen gewesen ist. Mithilfe des iterativ gewonnenen Zahlenwertes für $S_{l,neu}$ werden schließlich $p_{l,neu}$ aus Gleichung (6.4b) sowie $S_{g,neu}$ und $p_{g,neu}$ aus den Gleichungen (6.3b/c) erhalten.

Bei der Modellierung von Einphasenflussprozessen entfallen aufgrund der Modellvorstellung eines sich instantan ausbalancierenden Porengasdruckes auf den Referenzwert $p_{g,ref}$ die Unbekannte $p_g (\equiv p_{g,ref})$ und die Gleichung (6.3a) für $\varphi = g$, und Gleichung (6.3b) hat nunmehr lediglich einen Definitionscharakter für die Größe S_g , die im Rahmen der Simulatorenkopplung für den Einphasenfluss mit S_l als Primärvariable aus TOUGH2 ebenfalls keine Verwendung mehr findet. Mit analogen Bezeichnungen und ähnlichen Umformungen wie für die Gleichungen (6.4) resultiert somit für den Fall der Vollsättigung die lineare Gleichung (6.5) und für den Fall der Teilsättigung die nichtlineare Gleichung (6.6), die wiederum mit dem *Newton*-Verfahren bzw. seiner abgewandelten Form zu lösen ist:



$$p_{l;neu} = p_{l;alt} + \Xi_l \quad (6.5)$$

$$p_{cap}(S_{l;neu}) - \check{M}_l \phi \ln S_{l;neu} = p_{cap}(S_{l;alt}) - \check{M}_l \phi \ln S_{l;alt} - \Xi_l \quad (6.6)$$

mit

$$\Xi_l := -\alpha \check{M}_l \ln PV \text{ in MPa (positiv bei Kompaktion).}$$

Im Gegensatz zur Simulation von Zweiphasenflussprozessen ist es hierbei möglich, dass eine mechanisch induzierte Änderung des Volumens der Modellzone zu einem Wechsel ihres Phasenzustands von einphasig nach zweiphasig oder umgekehrt führen kann. Der den mechanischen Einfluss beschreibende Term Ξ_l würde in diesem Fall für den bisherigen Phasenzustand einen Porenwasserdruck von $p_{l;neu} < p_{g;ref}$ bzw. eine Wassersättigung von $S_l > 100\%$ verursachen und muss daher in zwei Anteile aufgeteilt werden, von denen einer exakt den Wechselzustand mit $p_{l;neu} = p_{g;ref}$ und $S_l = 100\%$ erzeugt, während der andere Anteil die hydraulische Zustandsänderung auf der Ebene des gewechselten Phasenzustands fortführt.

Die Aktualisierung der hydraulischen Zustandsgrößen und damit der Einsatz des *Newton*-Verfahrens, welches naturgemäß mehr Berechnungszeit benötigt als eine schlichtere Formelauswertung z.B. von Gleichung (6.5), geschieht sukzessive für jede Zone des Berechnungsmodells, was die Frage nach der erforderlichen Häufigkeit dieser Aktualisierung aufwirft. Eine Aktualisierung in jedem Ausbalancierungsschritt von FLAC^{3D} erscheint zu aufwendig und rechenzeitintensiv. Eine erste Idee ist daher, die Aktualisierung des hydraulischen Zustands möglichst selten vorzunehmen, d.h. die mechanische Kräfteausbalancierung von FLAC^{3D} für den aktuellen Zeitschritt zunächst vollständig auszuführen, bevor $S_{\varphi;neu}$ und $p_{\varphi;neu}$ nach obigen Gleichungen aus den Volumenverzerrungen berechnet werden. Dieser Vorgang wäre aufgrund eines nun erneut durch die Porendruckänderung induzierten mechanischen Kräfteungleichgewichtes so lange zu wiederholen, bis eine Ausbalancierung des gesamten hydro-mechanischen Zustands erreicht ist. Nach den im bearbeiteten Forschungsvorhaben gewonnenen Erfahrungen führt jedoch auch eine eher geringfügigere Änderung der Porendrücke (durch TOUGH2 oder durch die obigen Aktualisierungsgleichungen) bereits zu einer erhöhten Disbalance in den mechanischen Kräften, und FLAC^{3D} benötigt für die Ausbalancierung dieser Kräfte in der Regel mehr Zeit als beispielsweise TOUGH2 für die Strömungsberechnung bei kleinen Zeitschritten. Damit stellt sich diese Methode der Aktualisierung des hydraulischen Zustands doch als zeitintensiver heraus als gewünscht. In der Folge sind weitere Versu-

che unternommen worden, diese Aktualisierung nach einer festen Anzahl n von Ausbalancierungsschritten in FLAC^{3D} vorzunehmen mit dem Ergebnis, dass bereits für $n = 2$ größere bis signifikante Rundungsfehler im Ergebnis erhalten werden – insbesondere im Fall der Teilsättigung des Modells sind hier vom FTK-Simulator mitunter gravierend falsche Zahlenwerte für die Sättigung berechnet worden. Eine genaue Ursache für diese Beobachtung konnte nicht gefunden werden. Aktuell werden somit nach jedem mechanischen Ausbalancierungsschritt in FLAC^{3D} die Porendrücke und die Sättigungen über die Gleichungen (6.3) bis (6.6) aktualisiert.

Des Weiteren ist am geomechanischen Simulator FLAC^{3D} beobachtet worden, dass bei der Verwendung von Schädigungsmodellen der *Biot*-Koeffizient α im Hinblick auf die Bestimmung des Schädigungsgrads nicht in die Berechnung der Effektivspannung eingeht, d.h. dass zu diesem Zweck unabhängig von der benutzerseitigen Setzung der Zahlenwert $\alpha = 1$ verwendet wird. Um den vom Benutzer gewählten Zahlenwert für α auch in die Schädigungsrechnung von FLAC^{3D} miteinfließen zu lassen, ohne dabei gleichzeitig an anderen Stellen im FTK-Simulator Setzungen oder Übertragungen fehlerhafter Zahlenwerte zu erzeugen, ist entschieden worden, die Zahlenwerte für $\alpha \cdot p$ anstelle lediglich derjenigen für den äquivalenten Porendruck p an die in FLAC^{3D} für den Porendruck vorgesehene Stelle zu schreiben. Dieser Sachverhalt ist sowohl bei der Implementierung des FTK-Simulators zu berücksichtigen gewesen wie auch seitens des Benutzers bei der Dateneingabe (Anfangswerte, Befehlsreihenfolge bei der Porendrucksetzung) und bei der Ergebnisauswertung (grafische Darstellung, aufgezeichnete Zeitreihen) zu beachten.

6.2.4 Zeitschrittsteuerung

Im Zusammenhang mit dem FTK-Simulator sind sowohl mit TOUGH2 wie auch ggf. mit FLAC^{3D} zeitabhängige Prozesse (TH-Strömungsprozesse bzw. ggf. M-Kriechprozesse) zu simulieren, und sowohl TOUGH2 wie auch FLAC^{3D} besitzen zu diesem Zweck Strategien zur automatischen Zeitschrittsteuerung, die auf der Unter- und der Überschreitung von gewissen benutzerdefinierten Anzahlen von Iterationszyklen bzw. von benutzerdefinierten numerischen Fehlertoleranzen basieren:

- Bei den thermohydraulischen Strömungsprozessen in TOUGH2 wird nach jedem Berechnungszeitschritt die Laufnummer des Iterationszyklus des Lösungsverfahrens (*New-*



ton-Verfahren, in *Pruess et al. (1999/2012)* und anderen Literaturquellen auch als *Newton-Raphson-Verfahren* bezeichnet), an dem der numerische Fehler im neu erhaltenen thermohydraulischen Zustand hinreichend klein geworden ist, betrachtet: Liegt die Laufnummer auf oder unterhalb einer Untergrenze, wird die Zeitschrittweite für den folgenden Berechnungszeitschritt verdoppelt; liegt sie oberhalb einer Obergrenze (Divergenz des Lösungsverfahrens), wird die Zeitschrittweite reduziert und der letzte, ergebnislose Berechnungszeitschritt mit der reduzierten Zeitschrittweite wiederholt. Als Spezialfall gilt dabei die Laufnummer 1 – da die numerische Zustandsaktualisierung durch die *Newton-Iteration* erst *nach* der Fehlerabfrage erfolgt, ist bei einer Beendigung eines Berechnungszeitschrittes mit einer ausgegebenen Laufnummer von 1 numerisch keine thermohydraulische Zustandsänderung im gesamten Berechnungsmodell erfolgt ($p_\varphi(t + dt) = p_\varphi(t)$ etc.). Dieser Spezialfall tritt für gewöhnlich bei einer Wahl einer zu geringen Zeitschrittweite oder beim Erreichen des stationären Zustands auf. Der Anteil der mit TOUGH2 simulierten Zeit, bei der TH-Zustandsänderungen erfolgt sind, wird im Folgenden mit „substanzielle Zeit“ bezeichnet.

- Für die Simulation von Kriechprozessen besitzt FLAC^{3D} eine Zeitschrittsteuerung, bei der die Resultate der Berechnungszeitschritte grundsätzlich angenommen werden, wobei dann allerdings deren Approximationsgüte die Zeitschrittweite für den folgenden Berechnungszeitschritt (unter Berücksichtigung diverser benutzerdefinierter numerischer Parameter) festlegt. Diese Kriech-Zeitschrittsteuerung ist programmtechnisch unabhängig von vom Benutzer aufgebrauchten mechanischen Stoffmodellen in FLAC^{3D} realisiert und kann daher insbesondere auch gänzlich ohne Kriechmodelle angewendet werden. Es handelt sich bei ihr im Grundsatz also um eine vom mechanischen Fehler bestimmte Zeitschrittsteuerung ohne zwingenden Bezug auf mechanisch zeitabhängige Prozesse – die Steuerung kann damit prinzipiell auch bei thermohydraulisch induzierten Änderungen des mechanischen Zustands des Berechnungsmodells wirksam werden.

Neben den beiden auf die TH- bzw. M-Prozesse spezialisierten Zeitschrittsteuerungen von TOUGH2 und FLAC^{3D} existiert mit der Kopplungsfrequenz noch eine dritte Art der Zeitschrittsteuerung im FTK-Simulator, die die Güte der THM-Prozesskopplung bestimmt. Auch mit der „Kopplungsfrequenz“ f_K , d.h. der Aufrufhäufigkeit von TOUGH2 aus FLAC^{3D} pro simulierter Zeit und damit dem Kehrwert der mit TOUGH2 simulierten Zeit je Aufruf, wird die Qualität der berechneten zeitlichen Kurvenverläufe für die thermohydrmechanischen

Zustandsgrößen maßgeblich beeinflusst, wie Bild 6.2 veranschaulicht. Die oszillierende Form der Graphen für den Porenwasserdruck in Bild 6.2 wird durch das Einlesen der von TOUGH2 erstellten Zeitreihen in FLAC^{3D} (zeitabhängige Abschnitte) und anschließender Aufzeichnung der nach der hydromechanischen Ausbalancierung mit FLAC^{3D} erhaltenen Zahlenwerte (Sprünge) verursacht und spiegelt damit sehr einprägsam die sequenzielle Funktionsweise des FTK-Simulators und ihre Wirkung auf die Berechnungsergebnisse wider. Am Beispiel des grünen Graphen zur Kopplungsfrequenz von $f_K = 2/d$ ist deutlich zu erkennen, wie eine zu niedrige Kopplungsfrequenz zu einer starken Ungenauigkeit des Graphen führt. Würden in diesem Beispiel die Zahlenwerte für den Porenwasserdruck nur nach jedem vollständig abgelaufenen TH-M-Zyklus, also lediglich direkt nach der Ausbalancierung durch FLAC^{3D}, aufgezeichnet werden, so würde der gestrichelte grüne Graph erhalten werden, der sich von den präziseren orangefarbenen und blauen Graphen zu Kopplungsfrequenzen von $f_K = 20/d$ bzw. $f_K = 200/d$ um bis zu 65% unterscheidet.

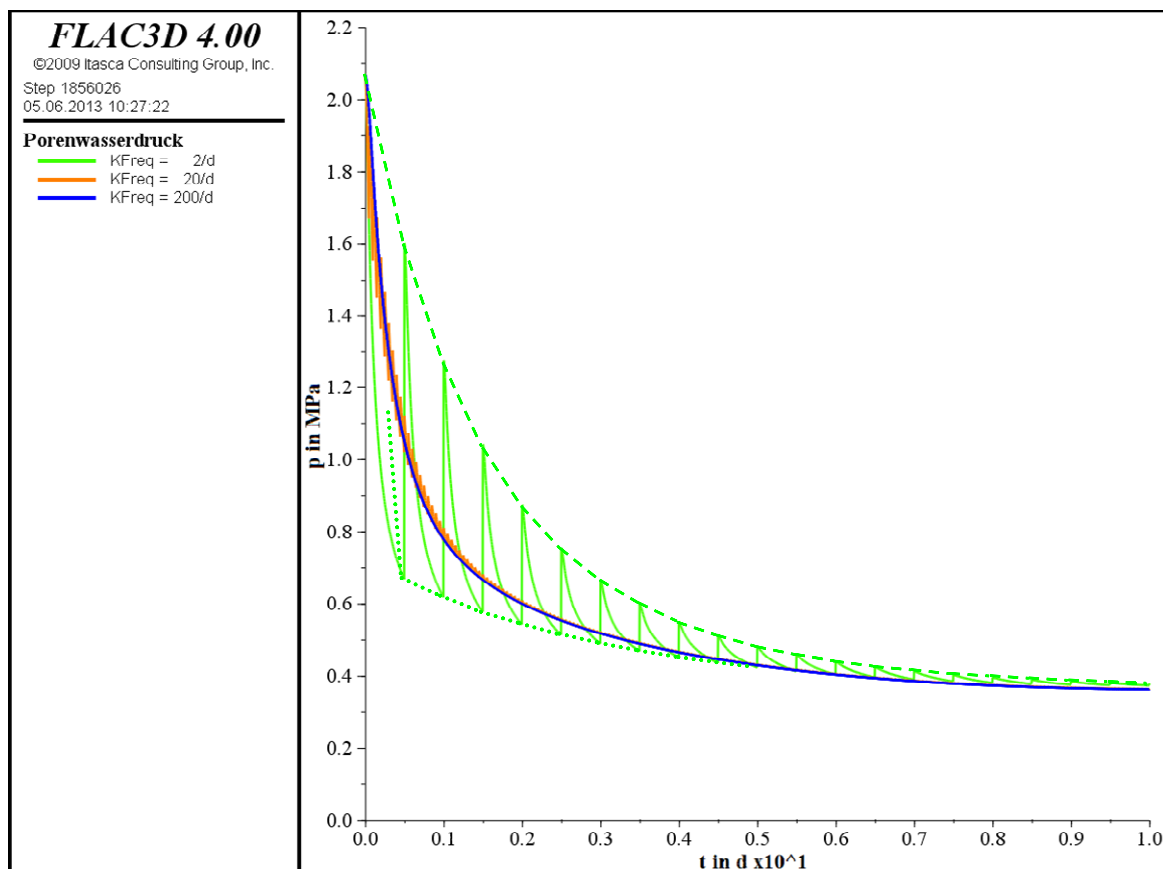


Bild 6.2: Porenwasserdruckabbau im Verlauf der Zeit (Auszug aus den Berechnungsergebnissen zum Modellbeispiel 2 aus Abschnitt 6.4.2.3) für drei verschiedene Kopplungsfrequenzen sowie Hilfslinien (gestrichelt, gepunktet) für den grünen Graphen



Sinnvoll ist es, auch terminologisch zwischen den Zeitschritten $\Delta t = 1/f_K$, also den in den einzelnen TOUGH2-Teilberechnungen simulierten Zeiträumen, und den Zeitschritten dt , mit denen die beiden separaten Simulatoren ihre Teilberechnungen durchführen, zu differenzieren. Erstere werden in diesem Abschnitt daher mit „Zeitabschnitte“, letztere mit „Zeitinkremente“ bezeichnet. Beim Export der Modell- und Simulationsdaten von FLAC^{3D} an TOUGH2 im Rahmen der FTK-Simulation sind mit dieser Terminologie nun hinsichtlich der Zeitschrittsteuerung die folgenden drei numerischen Parameter für den anschließenden TOUGH2-Aufruf zu übergeben: (1) der Zeitabschnitt Δt sowie (2) das anfängliche Zeitinkrement $dt_0 \leq \Delta t$ und (3) das maximale Zeitinkrement $dt_{max} \geq dt_0$ für die TH-Berechnung mit TOUGH2.

In der Regel sind bei der benutzerseitigen Erstellung eines Eingabeprogrammes für den FTK-Simulator die Parameter Δt , dt_0 und dt_{max} vor Beginn der Simulation zu initialisieren sowie bei Bedarf vorab für weitere Zeitpunkte im Simulationsverlauf neu zu setzen. Vom LfD&G sind in diesem Kontext allerdings verschiedene Strategien für eine automatisierte Adaption der Parameter Δt und dt_0 während der Simulation erarbeitet und getestet worden. Da die mechanischen Disbalancen (Kräfteungleichgewichte) im Berechnungsmodell mit den thermohydraulischen Disbalancen (Abweichungen vom stationären Zustand) einhergehen, können als Ansatzpunkt für eine Strategie zur Adaption von Zeitabschnitt und Zeitinkrement sowohl der Balancierungsgrad in FLAC^{3D} wie auch die Konvergenzgeschwindigkeiten der *Newton*-Iterationen in TOUGH2, also die Laufnummern am Ende jedes Berechnungszeitschrittes, verwendet werden. Beide Strategien sind bei der Bearbeitung dieses Forschungsvorhabens parallel zueinander verfolgt worden.

Bei den an den Geschwindigkeiten des *Newton*-Verfahrens in TOUGH2 orientierten Strategien bestand die Grundidee für die Zeitschrittanpassung in einer Reduzierung oder gar Eliminierung der nicht-substanziellen Zeit in den TOUGH2-Berechnungsergebnissen (siehe oben) durch Heraufsetzung von dt_0 und damit auch von Δt im Verlauf der gekoppelten Simulation. Aufgrund von unerwünschten Interaktionen zwischen den implementierten Zeitschrittsteuerungsalgorithmen und den vielfältigen Möglichkeiten im Ausgang der TOUGH2-Berechnungsabläufe mussten die angesetzten Strategien immer wieder verändert werden. Wesentliche TOUGH2-ergebnisbasierte Ansätze sind dabei gewesen:



- Bei nicht-substanziellen Zeiten zu Beginn der Berechnung, die zu geringen Zeitinkrementen zugeschrieben worden sind, ist die TOUGH2-Teilberechnung mit heraufgesetzten Zahlenwerten sowohl für dt_0 wie auch für Δt wiederholt worden. Aus Sicht der geomechanischen Berechnungsergebnisse ist der parallele Anstieg des Zeitabschnitts auf diese Weise jedoch tendenziell zu schnell erfolgt.
- Die Heraufsetzung des Zeitabschnitts ist in der Folge auf die Fälle beschränkt worden, in denen das anfängliche Zeitinkrement die Größenordnung des Zeitabschnitts erreicht hat, was allerdings wiederum zu eher langsamen FTK-Simulationen geführt hat.
- Die Beobachtung des Auftretens von nicht-substanzieller Zeit in der Mitte der TOUGH2-Berechnung motivierte die Unternehmung weiterer Versuche, die zu einem differenzierteren Annahme-oder-verwerf-Ansatz geführt haben. Bei diesem Ansatz sind TOUGH2-Berechnungsergebnisse nur dann angenommen worden, wenn ein bestimmter (benutzerdefinierter) Prozentsatz des Zeitabschnitts substantiell gewesen ist; ansonsten wird Δt und ggf. auch dt_0 erhöht. Unerwartete TOUGH2-Berechnungsergebnisse mit nur einer geringen substantiellen Zeit zu Beginn der Simulation führten hierbei jedoch mitunter zu Endlosschleifen in der FTK-Simulation, da eine Heraufsetzung des Zeitabschnitts in diesen Fällen den Prozentsatz der substantiellen Zeit lediglich weiter verringert hat.
- Schließlich ist dazu übergegangen worden, die nicht-substanzielle Zeit aus den TOUGH2-Berechnungsergebnissen zu übergehen, d.h. den Simulationszeitpunkt nach der TOUGH2-Teilberechnung nur um die substantielle Zeit anstelle um den gesamten Zeitabschnitt heraufzusetzen. Wird kein Kriechmodell verwendet, kann die HM-Ausbalancierung mit FLAC^{3D} ungeachtet der verkürzten TH-simulierten Zeit direkt im Anschluss an die TH-Teilsimulation erfolgen. Erhöht wird in diesem Zeitschrittsteuerungsansatz erneut primär dt_0 im Fall von nicht-substanzieller Zeit zu Beginn der TOUGH2-Teilberechnung; Δt wächst erst, sobald $dt_0 > \Delta t$ wird. Auch hier sind erneut unerwünschte Nebeneffekte aufgetreten, beispielsweise durch Rundungsfehler in der Erfassung der substantiellen Zeiten, welche zu Endlosschleifen geführt haben.

Bei den Strategien zur Zeitschrittsteuerung, die am Balancierungsgrad von FLAC^{3D}, d.h. am Verhältnis der noch unausgeglichenen mechanischen Kräfte zu den vorliegenden mechanischen Kräften, orientiert sind, bestehen die Optionen, eine eigene Steuerung in Abhängigkeit

des unbalancierten Kräfteverhältnisses zu implementieren oder die programminterne automatische (Kriech-)Zeitschrittsteuerung zu verwenden:

- Mit Blick auf eine Kompatibilität des FTK-Simulators zu tatsächlich zu simulierenden Kriechprozessen ist von den FLAC^{3D}-balancierungsgradbasierten Ansätzen zunächst der Ansatz über die automatische Zeitschrittsteuerung verfolgt worden, wobei sowohl Δt wie auch dt_0 gleich dem Kriechzeitinkrement aus FLAC^{3D} gesetzt worden sind. Im Fall einer zu geringen substantiellen Zeit aus der TOUGH2-Teilberechnung sind weitere mechanische Teilberechnungen erfolgt und ihre Ergebnisse aufsummiert worden, bis ein TH-Berechnungslauf annehmbare Ergebnisse geliefert hat. Da das Einlesen der TOUGH2-Berechnungsergebnisse in der Regel zu einer deutlichen Erhöhung des Kräfteungleichgewichtes führt, ergeben sich aus diesem Ansatz heraus eher geringe Zeitabschnitte (= Kriechzeitinkremente) und damit insbesondere für Simulationen mit einer hohen hydraulischen Aktivität lange Simulationsdauern. Wenngleich die Kriech-Zeitschrittsteuerung mitunter auch zu besseren Simulationsergebnissen geführt hat als der zum selben Bearbeitungszeitpunkt bestehende TOUGH2-ergebnisbasierte Algorithmus, so sind mit ihr doch insbesondere im Rahmen von komplexeren Berechnungsmodellen (2D, 3D) des Öfteren numerische Instabilitäten, schwer nachvollziehbare Berechnungsergebnisse oder Programmabstürze aufgetreten.
- Alternativ zur automatischen Zeitschrittsteuerung ist eine manuelle Steigerung der Zeitabschnitte und anfänglichen Zeitinkremente für TOUGH2 anhand des Balancierungsgrades in FLAC^{3D} nach dem vorangegangenen Import der TOUGH2-Berechnungsergebnisse implementiert worden. Dabei ist zu beachten gewesen, dass von FLAC^{3D} das durch den Import der hydraulischen Zustandsgrößen erhaltene verstärkte Kräfteungleichgewicht je nach Größe der hydraulischen Zustandsänderungen unterschiedlich schnell reduziert wird. Der Balancierungsgrad in FLAC^{3D} zur Bestimmung der neuen Zeitschrittdaten ist daher nicht direkt nach dem Import, sondern wenige Ausbalancierungsschritte später betrachtet worden. Zudem ist darauf geachtet worden, dass die Steigerung der Zeitabschnitte nicht zu übereilt durchgeführt wird.

Mit dem jeweils letzten der TOUGH2- und FLAC^{3D}-basierten Ansätze konnte weitgehend zufriedenstellend gearbeitet werden, wenngleich sich eine optimale allgemeine Strategie für eine Zeitschrittsteuerung für den FTK-Simulator bislang noch nicht aus den Ansätzen und Ideen hervorgehoben hat. Eine Zeitschrittsteuerungsstrategie, mit der für Berechnungsmodelle



mit einer eher geringen Abnahme der hydraulischen Aktivität gleichzeitig sowohl signifikant kürzere Simulationsdauern wie auch im zeitlichen Verlauf sehr gute THM-Simulationsergebnisse erhalten werden können, konnte nicht gefunden werden, und angesichts von Bild 6.2 und der sequenziellen Natur der Prozesskopplung erscheint dieses Ziel in diesem Maß auch nicht erreichbar und realistisch.

In jüngerer Zeit ist zudem auch dazu übergegangen worden, über den Fortran-Programmcode von TOUGH2 nicht-substanzielle Berechnungszeitschritte gänzlich auszuschließen. Ein nicht ungewöhnliches Phänomen bei einer TOUGH2-Simulation ist die zweimalige Verdopplung eines nicht-substanziellen Zeitinkrements in Folge (da in beiden Berechnungszeitschritten keine thermohydraulischen Zustandsänderungen erfolgt sind), gefolgt von einem Berechnungszeitschritt mit numerischer Divergenz des *Newton*-Verfahrens, bei dem in TOUGH2 das Zeitinkrement standardmäßig durch vier geteilt und somit auf den Ausgangswert von vor den Verdopplungen zurückgesetzt wird. Tritt das beschriebene Phänomen auf, bricht der TOUGH2-Simulator die Berechnung zur Zeitersparnis automatisch ab, da sich andernfalls der TH-Zustand für den Rest der Simulation nicht mehr ändern würde (aus lediglich numerischen Gründen und daher möglicherweise fälschlicherweise). Die Forcierung von mindestens einem vollständigen *Newton*-Iterationsschritt je Berechnungszeitschritt in TOUGH2 verhindert diese Art von Programmabbruch, macht aber auch die oben aufgelisteten Ansätze zur Bestimmung von Δt und dt_0 anhand von nicht-substanziellen Zeiten unwirksam.

Schließlich ist festzustellen, dass die Erarbeitung eines sinnvollen Algorithmus zur Zeitschrittsteuerung für den FTK-Simulator nichttrivial ist und bis zu einem gewissen Grad auch von dem jeweils zu bearbeitenden Berechnungsmodell und den dafür erhaltenen Berechnungsergebnissen von TOUGH2 abhängt.

6.2.5 Ablauf einer THM-gekoppelten Simulation mit dem FTK-Simulator

Bild 6.3 zeigt ein Strukturdiagramm für den erarbeiteten $FLAC^{3D}$ -TOUGH2-Kopplungs-Simulator zur groben Veranschaulichung der programm- und programmertechnischen Bestandteile des Simulators, der bei einer Simulation ablaufenden Vorgänge und der Bedienung seitens des Benutzers. Die benutzerseitige Erstellung eines FTK-Programms und damit verbunden der Ablauf der THM-gekoppelten Simulation beginnen mit dem Aufbau des geometrischen Berechnungsmodells in $FLAC^{3D}$, der Initialisierung der erforderlichen skalaren und



vektoriellen FTK-Variablen und der Parameter für das geomechanische Stoffmodell, der Aufbringung von THM-Anfangs- und Randbedingungen auf das geometrische Modell sowie der Festlegung von Zonen und Knotenpunkten für Zeitreihen von vorwiegend mechanischen Zustandsvariablen und von numerischen Rückgabeinformationen aus FLAC^{3D} (wie z.B. unbalancierte Kräfte). Falls zusätzlich Zeitreihen von thermohydraulischen Zustandsvariablen und insbesondere Massen-/Energiebilanzen in TOUGH2 aufgezeichnet werden sollen oder das Modell thermische oder hydraulische Quellen beinhaltet, sind außerdem die entsprechenden externen Textdateien zu erstellen. Es folgt wie bei FLAC^{3D}-Simulationen üblich die Ausbalancierung des primären Spannungszustands, die hier jedoch nur einseitig gekoppelt stattfindet: Die bereits initialisierten Porendrücke werden zwar für die Berechnung der Effektivspannungen während der Ausbalancierung benötigt, allerdings ihrerseits nicht durch die dabei entstehenden Verzerrungen verändert, da diese Verzerrungen nur aus der Numerik herrühren und keine realen Verzerrungen im Rahmen der durchzuführenden Simulation darstellen. Deformationen und Verzerrungen werden nach der Ausbalancierung des mechanischen Primärzustands mit FLAC^{3D} wie üblich gelöscht.

Nachdem der primäre thermisch-hydraulisch-mechanische Zustand erhalten worden ist und das Berechnungsmodell somit für die eigentliche Simulation startbereit ist, kann der technologische Eingriff in das geogene System simuliert werden. Im Fall von mechanischen Eingriffen wie Hohlraumausbrüchen, Hohlraumverfüllungen oder der Ablagerung von wärmeentwickelnden Abfällen bzw. der Installation von Erhitzern sind dabei auch Veränderungen an den thermohydraulischen Randbedingungen und Materialparametern zu implementieren. Vor Beginn der zeitlichen Verlaufssimulation sind die instantanen Spannungumlagerungen wiederum durch mechanische Ausbalancierung des Berechnungsmodells mit FLAC^{3D} zu berechnen, wobei nun aber auch der M→H-Kopplungseinfluss über die dabei entstehenden Volumenverzerrungen und die daraus resultierenden Porenvolumen- und Porendruck-/Sättigungsänderungen zu berücksichtigen ist.

Für die zeitliche Verlaufssimulation werden nun die Daten aus den externen Textdateien eingelesen sowie vorliegende Modelldaten für TOUGH2 geeignet transformiert, gesammelt und für den Export bereitgestellt. Daraufhin ist die THM-gekoppelte Simulation sequenziell in einer Schleife auszuführen: Bis zum Erreichen eines vorgegebenen End- oder Zwischenzeitpunktes werden für jeden Zeitschritt wechselseitig

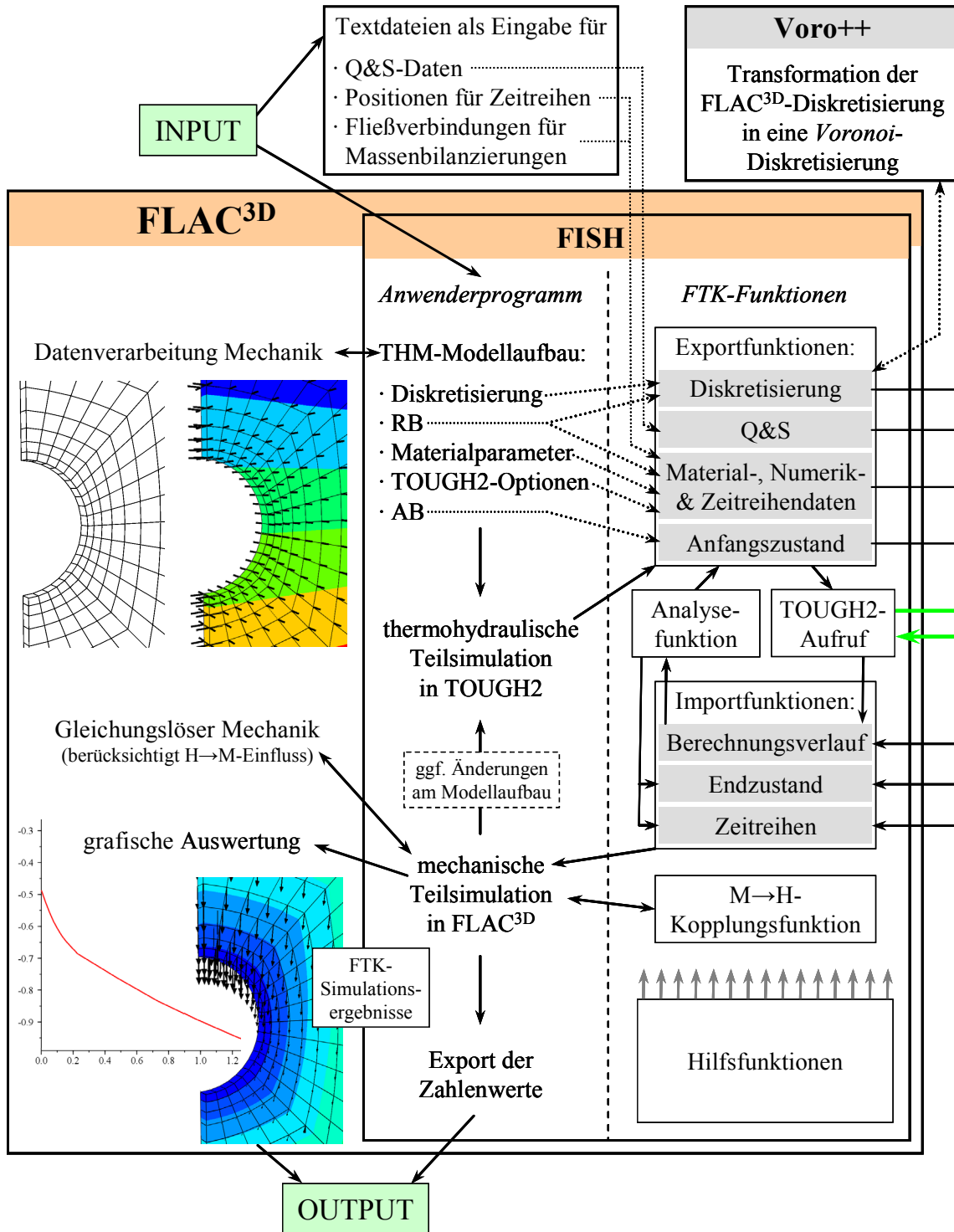
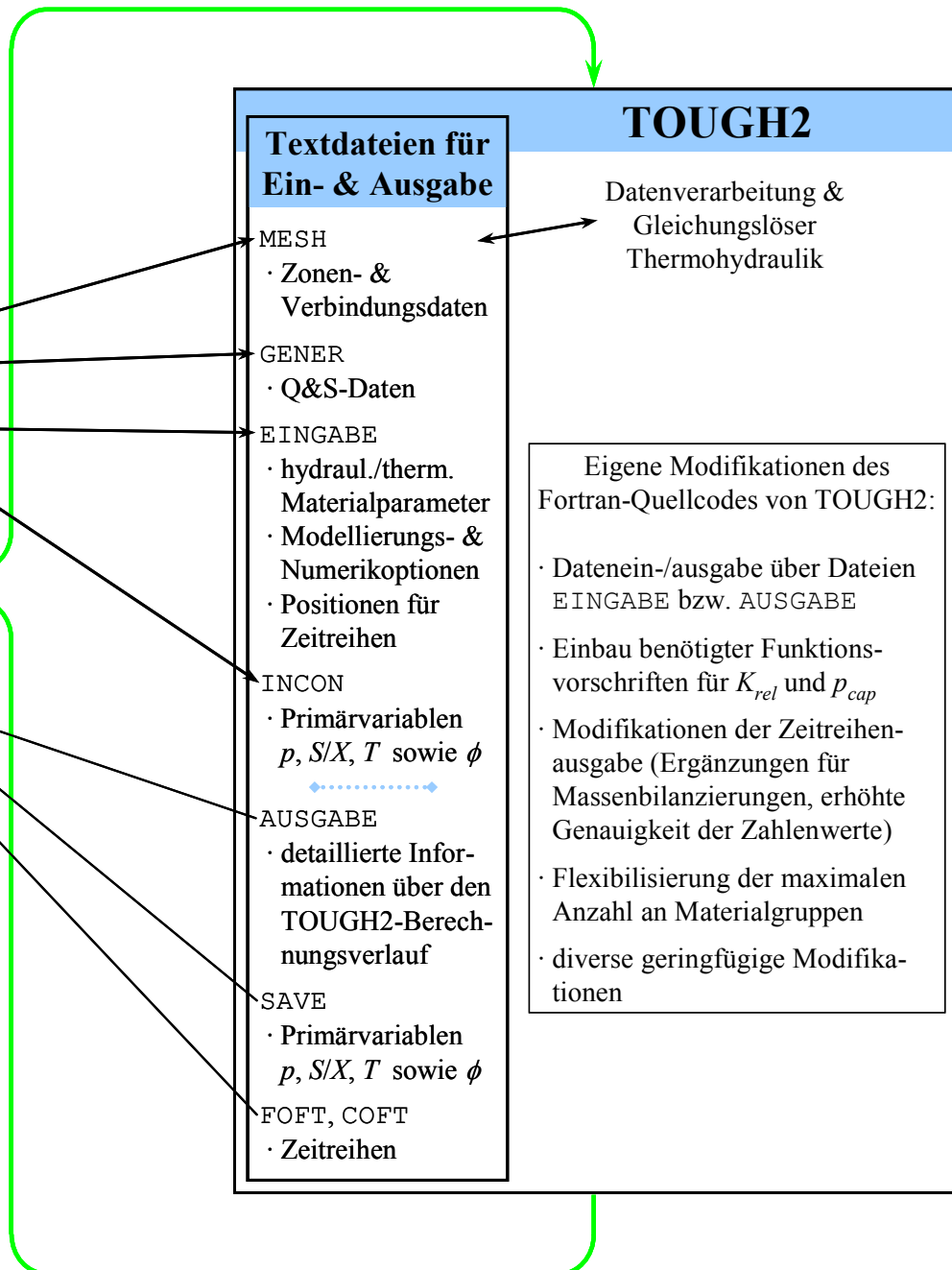


Bild 6.3: Strukturelle Veranschaulichung der Funktionsweise des FTK-Simulators (Q&S: Quellen und Senken; RB: Randbedingungen; AB: Anfangsbedingungen)



- eine thermohydraulische Teilsimulation, bestehend aus Datenexport, TOUGH2-Aufruf (TH-Strömungsprozesse), Ergebnisanalyse und Datenimport (berücksichtigt T→M-Einfluss) und
- eine geomechanische Teilsimulation in $FLAC^{3D}$ (instantane Spannungsausbalancierung, ggf. gefolgt von Kriechprozessen in einem oder mehreren Modellbereichen; berücksichtigt H→M-Einfluss) mit Porendruck- und Sättigungsanpassung (M→H-Einfluss) nach jedem $FLAC^{3D}$ -Balancierungs- oder -Kriechschritt

durchgeführt. Bild 6.4 stellt diesen Vorgang sowohl für instantane wie auch für zeitabhängige geomechanische Prozesse schematisch dar. Sinnvoll ist es, im Fall von lediglich instantanen geomechanischen Prozessen mit der thermohydraulischen Teilsimulation zu beginnen, da eine anfängliche geomechanische Teilsimulation einen bereits ausbalancierten Zustand lediglich erneut ausbalancieren würde; im Fall von zeitabhängigen Prozessen ist auch die umgekehrte Reihenfolge erlaubt. Hinsichtlich der Berechnungsdauer konnte insbesondere auch schon bei kleineren Testmodellen beobachtet werden, dass die $H \leftrightarrow M$ -gekoppelte Ausbalancierung in jeder $FLAC^{3D}$ -Teilsimulation die meiste Zeit beansprucht, während die zugehörige TH-Strö-

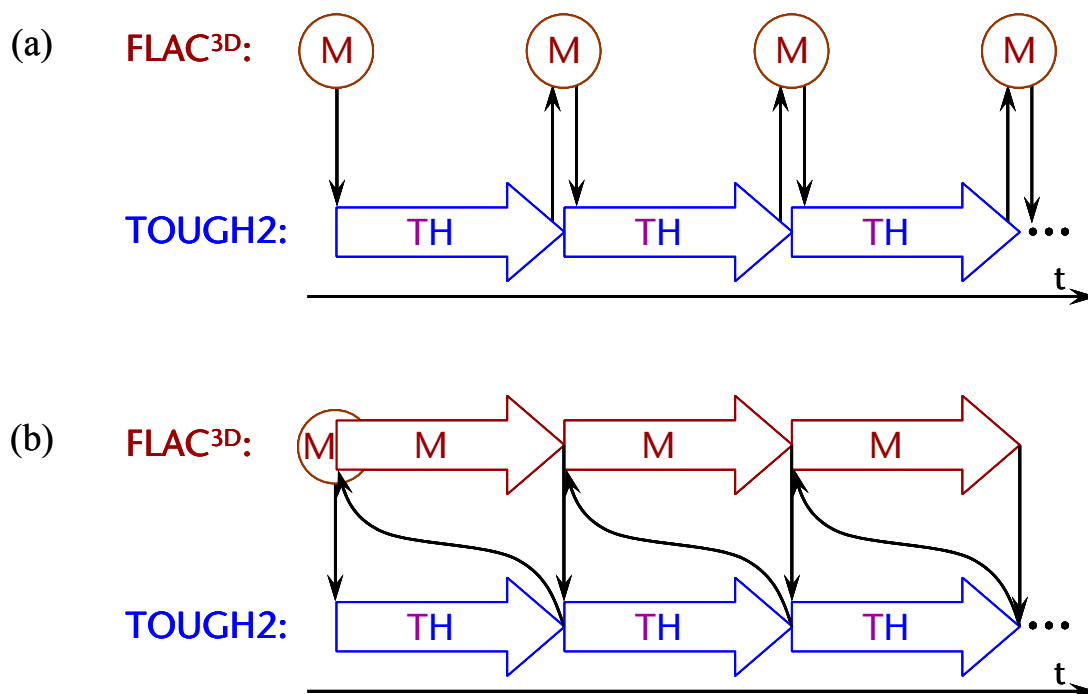


Bild 6.4: Schema der sequenziellen Kopplung von $FLAC^{3D}$ und TOUGH2 im zeitlichen Verlauf, inklusive der anfänglichen instantanen Spannungsausbalancierung, (a) bei zeitunabhängigen geomechanischen Stoffmodellen und (b) bei mindestens einem zeitabhängigen geomechanischen Stoffmodell



mungssimulation in TOUGH2 relativ schnell vonstatten geht. Versuche, die H↔M-gekoppelte Ausbalancierung durch einen selteneren Aufruf der Porendruck- und Sättigungsanpassungsfunktion zu beschleunigen, sind jedoch aufgrund von signifikanten numerischen Fehlern im Berechnungsergebnis bis hin zur Destabilisierung des gesamten Ausbalancierungsprozesses fehlgeschlagen.

Umfasst die vom Benutzer durchzuführende Simulation mehrere Abschnitte mit sich verändernden Rahmenbedingungen (z.B. Streckenvortrieb, Hohlraumverfüllung, Schachtflutung, Beginn oder Abschwächung einer Wärmeentwicklung von radioaktiven Abfällen, zyklische Ein- und Ausspeisung von Luft), so sind in geeigneter Weise mehrere solcher Schleifen zu implementieren, zwischen denen die Rahmenbedingungen entsprechend anzupassen sind. Auch ohne eine Änderung der Rahmenbedingungen können mehrere aufeinanderfolgende Schleifen mit veränderten Zeitschritten sinnvoll sein, z.B. bei der Approximation eines stationären THM-Zustands.

6.2.6 FLAC^{3D} als Prä- und Postprozessor für TOUGH2 („TOUGH2 aus FLAC^{3D}“)

Bedingt durch die Geschichte des Simulators TOUGH2 und der Fortran-Programmierung erfolgen Ein- und Ausgabe bei TOUGH2 mittels Textdateien. Eine grafische Benutzeroberfläche (graphical user interface, GUI) wie bei moderneren Simulationsprogrammen ist nicht vorhanden. Zwar existiert ein eingebautes Unterprogramm in TOUGH2 zur Erstellung von diskretisierten geometrischen Modellen, jedoch sind mit diesem Unterprogramm lediglich Modelle mit stark eingeschränkten Geometrien erzeugbar (radialsymmetrische oder orthogonale Modelle). Für komplexere Modellgeometrien sind daher ein Präprozessor zur Erstellung eines diskretisierten geometrischen Modells inklusive Anfangsbedingungen sowie ein Postprozessor zur geeigneten Visualisierung der von TOUGH2 erhaltenen Ergebnisdaten erforderlich. Im Rahmen des FTK-Simulators fungiert FLAC^{3D} über die FTK-Funktionen und die Eingabedateien GESCHICHTEN und BILANZ sowohl als Prä- wie auch als Postprozessor, wie Bild 6.5(a) veranschaulicht.

Mit dem geomechanischen Simulator FLAC^{3D} sind herstellerseitig auch Kopplungen mit hydraulischen und/oder thermischen Prozessen möglich, die durch das Hinzuschalten der Prozesse mit entsprechenden FLAC^{3D}-Kommandos eingeleitet werden. Die geomechanischen Prozesse werden bei einer FLAC^{3D}-Simulation automatisch von Beginn an hinzugeschaltet,

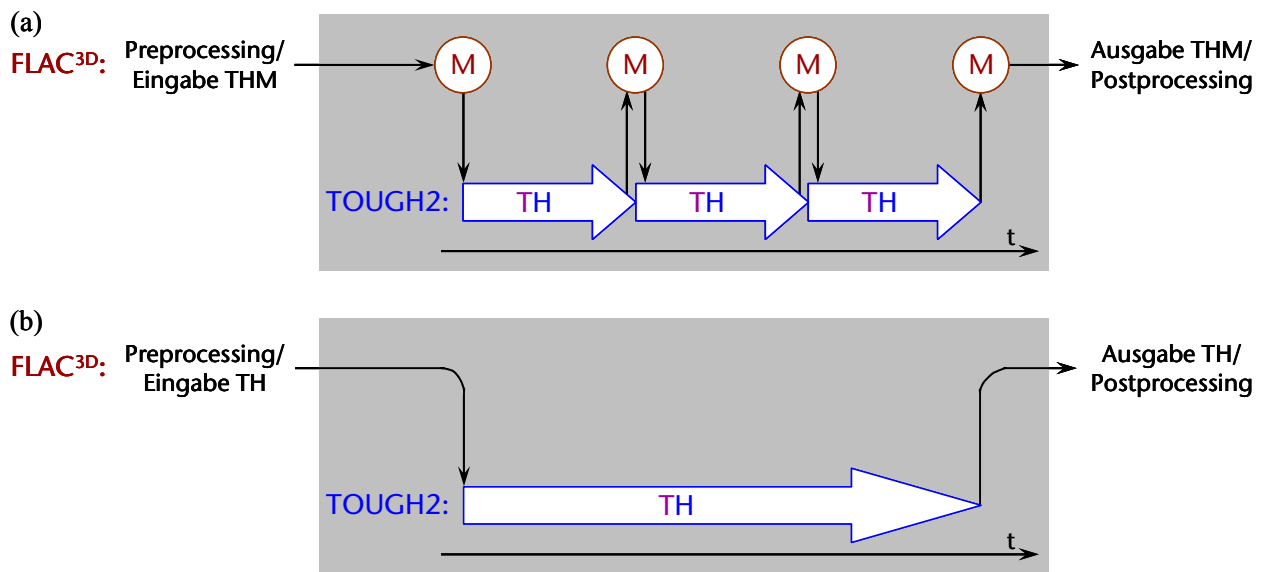


Bild 6.5: Schemata (a) der generellen THM-Prozesskopplung im FTK-Simulator und (b) für die Funktionalität „TOUGH2 aus FLAC^{3D}“; aus Sicht des Benutzers agiert der FTK-Simulator in beiden Fällen als „Black Box“ für TOUGH2

können aber auch vom Benutzer abgeschaltet werden, um die Durchführung von lediglich H-, T- oder TH-Simulationen zu ermöglichen. Auf diese Weise ist es möglich, alle Prozesse in FLAC^{3D} abzuschalten und über die FTK-Funktionen wie in Bild 6.5(b) dargestellt lediglich Initialisierungen, den Aufruf und Ergebnisauswertungen für bzw. von TOUGH2 auszuführen. Der FTK-Simulator kann somit als Prä- und Postprozessor für thermohydraulische Simulationen mit TOUGH2 verwendet werden („TOUGH2 aus FLAC^{3D}“-Funktionalität), wobei der Benutzer mit dem Simulator TOUGH2 selbst – gemäß dem mit der FTK-Implementierung verfolgten Ziel der Abstraktion von TOUGH2 – nur marginal in Kontakt kommt und keine tiefgreifenden Kenntnisse von TOUGH2 für die Arbeit mit „TOUGH2 aus FLAC^{3D}“ benötigt. Für „TOUGH2 aus FLAC^{3D}“ stehen in der Folge auch weitere im FTK-Simulator enthaltenen Funktionalitäten zur Verfügung:

- Modellaufbau, TH-Materialparameter, lokale thermohydraulische Zustände sowie Randbedingungen und Quellen können nach Ablauf von gewünschten simulierten Zeiträumen modifiziert werden, um veränderte Rahmenbedingungen im modellierten (Geo-) System (z.B. im Verlauf der Betriebsphase eines Endlagers) auf das Berechnungsmodell abzubilden.
- Wie in Abschnitt 6.2.5 bereits beschrieben worden ist, wird die sequenzielle Kopplung von FLAC^{3D} und TOUGH2 über eine Schleife, in der die TH- und M-Teilberechnungen

wechselweise gestartet werden, realisiert. Die Schleife wird zum Anfangszeitpunkt der Simulation mit einer bestimmten Kopplungsfrequenz gestartet und läuft bis zu einem vom Benutzer gewählten Endzeitpunkt, d.h. sie wird fortgesetzt, wenn nach Beendigung einer zeitabhängigen TOUGH2-Teilberechnung mit anschließender FLAC^{3D}-Kräfteausbalancierung der Endzeitpunkt noch nicht erreicht worden ist – unabhängig davon, aus welchem Grund die TOUGH2-Teilberechnung beendet worden ist. Für „TOUGH2 aus FLAC^{3D}“ bedeutet diese Vorgehensweise (unter Wegfall der mechanischen Kräfteausbalancierung in der Schleife) insbesondere auch, dass nach einem instabilitätsbedingten Abbruch von TOUGH2 oder nach einer TOUGH2-Teilberechnung, bei der die substanzielle Zeit nicht die gesamte zu simulierende Zeit umfasst, mindestens ein weiterer TOUGH2-Programmaufruf für die noch verbleibende zu simulierende Zeit erfolgt, wie in den Bildern 6.6 und 6.7 skizziert ist. Zudem beginnt dieser zusätzliche TOUGH2-Aufruf nicht mit dem zuletzt erhaltenen Zeitinkrement dt , in dessen Größenordnung die numerische Instabilität bei dem letzten TOUGH2-Aufruf entstanden ist, sondern mit dem aktuellen anfänglichen Zeitinkrement dt_0 , was die Wahrscheinlichkeit einer erfolgreichen folgenden TOUGH2-Teilberechnung erhöht. Auf diese Weise besitzt „TOUGH2 aus FLAC^{3D}“ also grundsätzlich die Fähigkeit, die auf die genannten Weisen in einer gewöhnlichen TOUGH2-Berechnung verloren gehenden Zeiten nachzuholen.

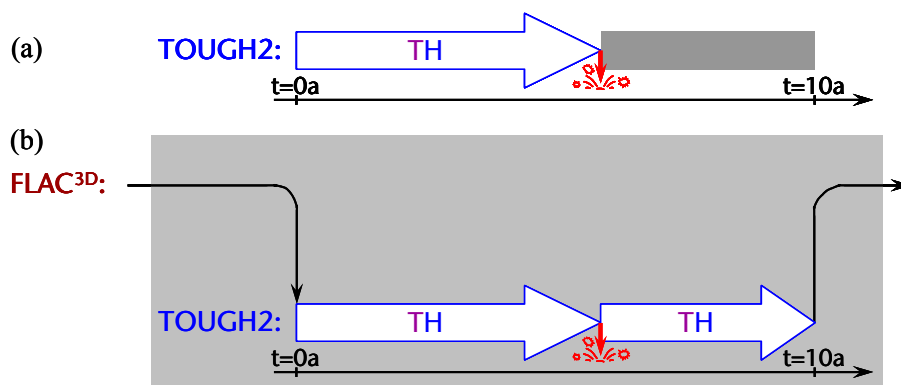


Bild 6.6: *Simulatorenverhalten im Fall eines instabilitätsbedingten Programmabsturzes von TOUGH2: Simulation über 10a (a) nur mit TOUGH2 (der infolge des Absturzes nicht simulierte Zeitraum verfällt) und (b) mit der Funktionalität „TOUGH2 aus FLAC^{3D}“ des FTK-Simulators (der nicht simulierte Zeitraum wird nachholt)*

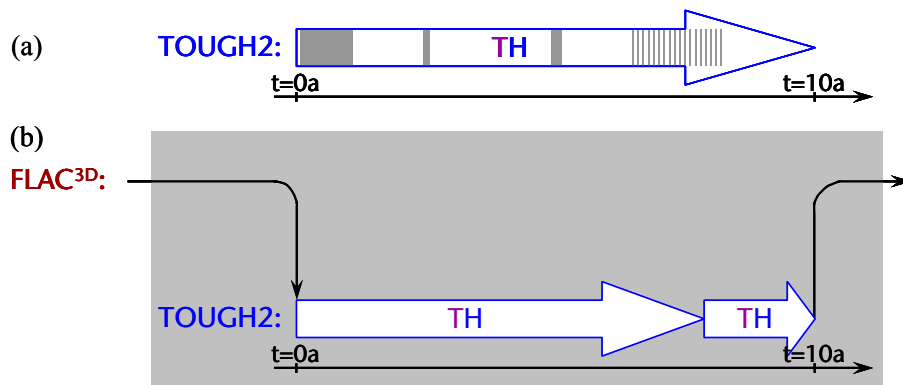


Bild 6.7: Simulatorenverhalten bei nicht-substanziellen Zeiten im TOUGH2-Berechnungsergebnis: Simulation über 10a (a) nur mit TOUGH2 (die nicht-substanzielle Zeit verfällt) und (b) mit der Funktionalität „TOUGH2 aus FLAC^{3D}“ des FTK-Simulators (die nicht-substanzielle Zeit wird nachgeholt)

6.3 Grundlegende hydraulische Berechnungen mit dem Programmpaket TOUGH2 zum Prozessverständnis

6.3.1 Einführung

Anhand des TOUGH2-Benutzerhandbuches *Pruess et al (1999)* und mit Hilfe von Eingabedateien zu einem einfachen Modellbeispiel, die dem LfD&G vom LBNL zur Verfügung gestellt worden sind, ist vom LfD&G die Einarbeitung in das Programm TOUGH2 und seine Ein- und Ausgabestrukturen erfolgt sowie mit der Implementierung der FTK-Funktionen begonnen worden. Das primäre Ziel bei den anfänglichen Programmierarbeiten ist dabei gewesen, eine Schnittstelle für den Datentransfer zwischen den Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2 zu erstellen, um die generelle Bedienbarkeit von TOUGH2 zu vereinfachen bzw. für komplexere Modelle überhaupt zu gewährleisten („TOUGH2 aus FLAC^{3D}“-Funktionalität, siehe Abschnitt 6.2.6). Thermohydraulische Simulationen ohne Einbeziehung von mechanischen Prozessen sind daher im Rahmen dieses Forschungsvorhabens fast ausschließlich über „TOUGH2 aus FLAC^{3D}“ durchgeführt worden. Diese Vorgehensweise birgt allerdings gerade im Stadium der Entstehung des gekoppelten FTK-Simulators die Gefahr, dass durch noch nicht vollständig ausgereifte FTK-Funktionen und -Konzepte Artefakte in die TOUGH2-Simulation miteingebracht werden, die zunächst möglicherweise nicht als solche identifiziert, sondern dem TOUGH2-Simulator zugeschrieben werden. Ein gravierendes Beispiel eines solchen Artefaktes, auf das im Abschnitt 6.3.3 in Beispiel (4) näher eingegangen wird, ist die Vernachlässigung der geringen, aber sich akkumulierenden Mengen an in der Gasphase ent-



haltenem Wasserdampf bzw. an in der Flüssigphase gelöster Luft bei zweiphasiger Modellierung der hydraulischen Strömungsprozesse.

Aufgrund der herstellerseitigen Modellierung der Strömungsprozesse in $FLAC^{3D}$ als Einphasenfluss ist zunächst eine Kopplung des sehr ähnlich implementierten Einphasenflussmoduls EOS9 von TOUGH2 (siehe Abschnitt 5.2.3.1) mit der geomechanischen Einheit und der grafischen Benutzeroberfläche von $FLAC^{3D}$ im Hinblick auf eine Verifikationsmöglichkeit des FTK-Simulators realisiert worden. Ausgewählte Simulationsergebnisse mit „TOUGH2-EOS9 aus $FLAC^{3D}$ “ hinsichtlich der mit der FTK-Zeitschrittsteuerung gewonnenen Erfahrungen sind kurz in Abschnitt 6.3.2 beschrieben. Nach dem weitgehenden Abschluss der Verifikationsberechnungen zum FTK-Simulator für den Einphasenfluss (FTK-EOS9) sind Arbeiten zur Erweiterung des FTK-Simulators für Zweiphasenflussprozesse vorgenommen worden. Für Zwei- oder Dreiphasenflussprozesse existieren in TOUGH2 diverse EOS-Module für die Modellierung verschiedener T/H/C-Szenarien, bei denen jeweils unterschiedliche Aspekte berücksichtigt werden (Beispiele: Wasserstoffentwicklung oder Radionuklidtransport bei der Endlagermodellierung, Lösung und Ausfällung von Salz bei Strömungsprozessen im salinaren oder salzhaltigen Gestein, CO_2 -Lösungswärmeeinflüsse bei der Geothermiemodellierung, Vorhandensein einer Ölphase bei der Modellierung von Erdöllagerstätten). Für den gekoppelten Simulator erschien eine Verwendung des grundlegenden Zweiphasenflussmoduls EOS3 mit den Komponenten Wasser und Luft sinnvoll und hinreichend. Verifikationsmöglichkeiten bestanden dabei nur in sehr beschränktem Maße, da analytische Lösungen für derart komplexe Prozesse und Gleichungssysteme nicht vorgelegen haben und sich ein Vergleich mit dem ebenfalls beim LfD&G vorliegenden Simulator FLAC (Version 7.0, *Itasca, 2011*) aus mehreren Gründen als schwierig erwiesen hat. Daher sind zunächst lediglich Simulationen auf Plausibilität zum Aufbau eines grundlegenden Verständnisses für Zweiphasenflussprozesse und den damit verbundenen Einflussgrößen durchgeführt worden, die in Abschnitt 6.3.3 beschrieben und analysiert werden. Auch für diese verständnisfördernden Simulationen sind einfache Modellgeometrien herangezogen worden, da sich die in den Simulationen auftretenden Phänomene auf diese Weise besser lokalisieren und analysieren lassen und mögliche Fehler im FTK-Programmcode oder in den Eingabedaten damit schneller identifiziert werden können. Diese ersten Zweiphasenflusssimulationen konnten aber schließlich durch Vergleichsberechnungen mit FLAC an einem vereinfachten, eindimensionalen Modell aus *Kühle et al. (1999)*, das ein Endlagerteilsystem bestehend aus einer verfüllten Kammer mit Gasentwicklung und einer verfüllten Strecke beschreibt, ergänzt werden. Die Berechnungsergebnisse mit dem

FTK-Simulator und FLAC werden in Abschnitt 6.3.5 einander und auch den in *Kühle et al. (1999)* dargestellten Berechnungsergebnissen mit dem Simulator MUFTE-Thermo (*Helmig et al., 1994; Emmert, 1996*) gegenübergestellt und analysiert. Als drittes EOS-Modul ist zuletzt das zu EOS3 analoge Modul EOS5 mit in den FTK-Simulator aufgenommen worden, mit dem Zweiphasenflussprozesse mit Wasserstoff anstelle von Luft simuliert werden können, siehe dazu Abschnitt 6.3.4.

6.3.2 Einphasenfluss und Teilsättigung mit passiver Gasphase – EOS-Modul 9

Erste Simulationen mit „TOUGH2-EOS9 aus FLAC^{3D}“ sind an einem eindimensionalen Berechnungsmodell aus zehn $1m^3$ großen, kubischen Modellzonen durchgeführt worden, das auch später zu hydraulischen und HM-gekoppelten Verifikationsberechnungen herangezogen worden ist. In Abschnitt 6.4.2 sind sowohl das Berechnungsmodell mit den jeweiligen Parametern, Anfangs- und Randbedingungen wie auch die Resultate der Simulationen und ihre Vergleiche mit analytischen Lösungen ausführlich dokumentiert, so dass hier lediglich kurz Erfahrungen hinsichtlich der implementierten Zeitschrittsteuerung wiedergegeben werden, die im Zusammenhang mit diesem einfachen Berechnungsmodell gewonnen worden sind.

Im Idealfall sollte das Ergebnis einer hydraulischen Berechnung mit „TOUGH2 aus FLAC^{3D}“ dem Ergebnis einer üblichen TOUGH2-Berechnung entsprechen, insbesondere auch in seinem zeitlichen Verlauf. Da im FTK-Simulator jedoch in früheren Entwicklungsstadien lediglich die Funktionalität zum Einlesen des TOUGH2-Endergebnisses und noch nicht diejenige zum Einlesen der TOUGH2-Zeitreihen implementiert worden war, ist dort zur Aufzeichnung der zeitlichen Größenentwicklungen die hydraulische Berechnung in mehrere aufeinanderfolgende, separate Zeitabschnitte zu unterteilen gewesen. In der Folge ist der zeitliche Verlauf der hydraulischen Größen bei einer FTK-Simulation nicht nur vom TOUGH2-Zeitinkrement dt , sondern auch von der Kopplungsfrequenz abhängig gewesen (auch ohne eine Kopplung mit mechanischen Prozessen). Ziel ist somit gewesen, die Steuerung der Kopplungsfrequenz derart zu implementieren, dass die Berechnungsergebnisse mit „TOUGH2 aus FLAC^{3D}“ konsistent zu denjenigen mit TOUGH2 sind, d.h. insbesondere abhängig von Konvergenzkriterien auf der hydraulischen Seite. In Bild 6.8 sind exemplarisch zwei mit dem FTK-Simulator erhaltene Porenwasserdruck-Zeit-Diagramme für das eindimensionale Berechnungsmodell mit unterschiedlichen Diskretisierungen, aber mit demselben Zeitschrittsteuerungsalgorithmus

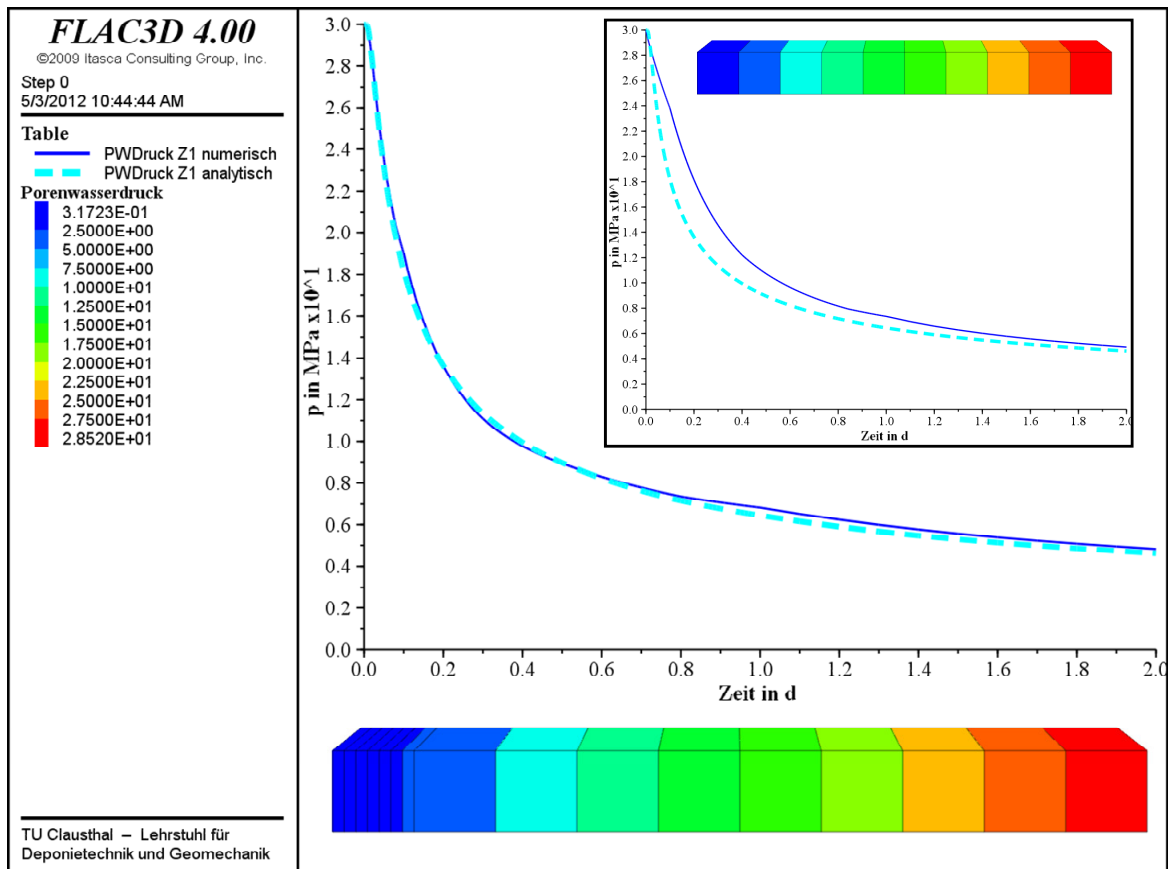


Bild 6.8: Berechnung des Porenwasserdruckabbaus an einem einfachen Modell mit zwei unterschiedlichen Diskretisierungen sowie Vergleich mit der analytischen Lösung für dieses Strömungsproblem

abgebildet und der analytischen Lösung gegenübergestellt. Die Graphen gelten jeweils für die Position $x = 0,5m$ in Bezug auf den linken Modellrand bzw. für die Modellzone an dieser Position. Hinsichtlich räumlicher und zeitlicher Diskretisierung kann in diesem Bild beobachtet werden:

- Der Einfluss der Unterteilung der ersten Modellzone in sieben Unterzonen ist in diesem Bild klar zu erkennen, d.h. eine hinreichend feine Diskretisierung von Modellbereichen, in denen hohe Gradienten zu erwarten sind und eine hohe Genauigkeit der Berechnungsergebnisse gewünscht wird, ist wie üblich ratsam.
- Die Zeitschrittsteuerung fußte zu diesem Zeitpunkt der Vorhabensbearbeitung auf der Erhöhung des anfänglichen TOUGH2-Zeitinkrements dt_0 und ggf. des Zeitabschnittes Δt bei nicht-substanziellen Zeiten zu Beginn des Berechnungsverlaufes der vorangegangenen TOUGH2-Berechnung, wobei Δt zu den Zeitpunkten $t = 0,1d$ und $1d$ manu-

ell neu gesetzt worden ist, um einem zu langsamen Anstieg von Δt entgegenzuwirken. In den Porenwasserdruck-Zeit-Diagrammen in Bild 6.8 können bis zu einem gewissen Grad auch die Änderungen der Zeitabschnitte in den Simulationsverläufen verfolgt werden. Deutlich sind dabei die beiden Neusetzungen der Zeitabschnitte an den Knicken in den Graphen zu den Zeitpunkten $t = 0,1d$ und $1d$ zu erkennen. Eine Simulation mit einem sich stetig verändernden Zeitschritt in sinnvollen Größenordnungen, mit dem theoretisch ein glatter Graph (ohne Knicke) in einer kürzeren Simulationsdauer erhalten werden könnte, ist mit der verwendeten Zeitschrittsteuerung nicht gelungen. Wenn gleich aber der verwendete Zeitschrittsteuerungsalgorithmus nicht optimal ist, so sind doch die berechneten Porenwasserdrücke bei einer hinreichenden Modelldiskretisierung quantitativ annehmbar.

6.3.3 Zweiphasenfluss Wasser/Luft – EOS-Modul 3

Zweiphasenflussprozesse können bei oberflächlicher Betrachtung analog zu Einphasenflussprozessen, die für gewöhnlich mit einer Bilanzgleichung, einer Strömungsgleichung und einer Fluidmenge-Druck-Beziehung beschrieben werden, mit einem doppelten Satz dieser mathematischen Gleichungen modelliert werden. Aufgrund der unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften der beiden Fluide und deren unterschiedlich starken Abhängigkeiten von Temperatur und Druck können sich bei einer Simulation mit Zweiphasenfluss bereits auf diese Weise nicht unerhebliche Abweichungen in den Berechnungsergebnissen im Vergleich zum Einphasenfluss ergeben. Bei genauerer Betrachtung sind Zweiphasenflussprozesse jedoch deutlich komplexer als Einphasenflussprozesse:

- Neben den beiden Phasen liegen in der Regel auch zwei oder mehr **Komponenten** vor, die in beiden Phasen auftreten können. In dem vorliegenden EOS-Modul handelt es sich um Wasser und Luft, die sich auf die Flüssigphase (Wasser mit einem geringen Massenanteil an gelöster Luft) und auf die Gasphase (Luft mit bei Normaltemperaturen geringen Mengen Wasserdampf) verteilen. Werden beispielsweise thermische Prozesse bei der Modellierung berücksichtigt und treten bei der Simulation Temperaturen in der Nähe des druckabhängigen Siedepunktes für Wasser auf, so resultieren daraus deutlich höhere Wasserdampfanteile an der Gasphase und in der Folge veränderte Strömungseigenschaften für diese Phase und damit für das gesamte System. Auch kann generell das



Fluid einer immobilen Phase indirekt durch Übertritt in die andere Phase weitertransportiert werden.

- Die Oberflächenspannung der Flüssigphase sowie die Grenzflächenspannung zwischen Flüssigphase und Korngerüst führen an der Phasenkontakfläche zur Ausbildung von Kapillarkräften, die bei den in EOS3 vorliegenden Fluiden in Richtung der Gasphase orientiert sind (Wasser fungiert hier als benetzendes Fluid). Der aus diesen Kräften resultierende **Kapillardruck** führt aufgrund des herrschenden Kräftegleichgewichts zu einem Druckunterschied zwischen Gas- und Flüssigphase gemäß Gleichung (5.16) und beeinflusst auf diese Weise die Strömungsintensität und ggf. auch die Strömungsrichtung der Fluide. Im Fall eines Materialbereiches mit hohem Gassättigungsgrad ist der Kapillardruck typischerweise groß und der Porenflüssigkeitsdruck dementsprechend niedrig, so dass Wasser aus umliegenden Bereichen mit einem weniger niedrigen Druck in den betrachteten Bereich hereingesogen würde (→ Synonym *Saugspannung*). Im umgekehrten Fall eines wassergesättigten Materialbereiches muss von der Luft aus umliegenden Bereichen mit einem identischen Porendruck zunächst der Kapillardruck überwunden werden, bevor die Luft in den betrachteten Modellbereich hereinströmen kann (→ *kapillarer Schwellen- oder Eindringdruck*).
- Eine Aufteilung des vorhandenen Porenraums auf mehrere fluide Phasen schränkt den Bewegungsspielraum jeder Phase ein und senkt damit die effektive Permeabilität der Phase in Bezug zu der bei nur einer vorhandenen Phase geltenden absoluten Permeabilität herab. Diese Permeabilitätsabsenkung, die üblicherweise über sättigungsabhängige **Relativpermeabilitäten** formuliert wird, kann die Strömungsprozesse stark verzögern, zumal sich die Relativpermeabilitäten für die beiden vorliegenden Phasen oftmals zu deutlich unter 100% addieren.
- Im Zusammenhang mit Kapillardrücken und Relativpermeabilitäten sind auch die **Restsättigungen** der Phasen relevante Größen – unterhalb einer bestimmten Untergrenze für die jeweilige Sättigung können die residualen Fluidmengen nicht mehr mit hydraulischen Mitteln aus dem porösen Medium physisch verdrängt werden (zur Verdunstung siehe Beispiel (3)) und sind somit immobil, weil sie aus verschiedenen physikalischen Gründen an der Oberfläche des Korngerüsts haften bleiben.

Die beschriebenen Phänomene des Zweiphasenflusses üben je nach dem modellierten Szenario einen geringeren oder größeren Einfluss auf das Simulationsergebnis aus, der vom Benut-

zer von TOUGH2 und damit auch vom Benutzer des FTK-Simulators bei der Auswertung in jedem dieser Szenarien eingeschätzt oder zumindest beachtet werden muss, um letztendlich das Simulationsergebnis hinsichtlich seiner Plausibilität bewerten und ggf. hinterfragen zu können.

Im Folgenden werden verschiedene hydraulische und thermohydraulische Simulationsergebnisse vorgestellt und diskutiert, die über „TOUGH2-EOS3 aus FLAC^{3D}“ erhalten worden sind. Dabei kommt in den meisten Simulationsbeispielen erneut das in dieser Arbeit bereits mehrfach verwendete und bewährte eindimensionale Zehnzonenmodell zum Einsatz, und die Sättigung S_l und der Porenwasserdruck p_l werden dort für alle zehn Modellzonen im zeitlichen Verlauf aufgezeichnet. Zur Zuordnung der Modellzonen zu den Graphen in den folgenden Bildern sind die Zonen durchnummeriert worden. Bild 6.9 zeigt das verwendete geometrische Modell mit Zonennummern und ggf. vorgesehenen Strömungsrichtungen an den Modellrändern, die durch dort aufgebraute Randbedingungen realisiert werden.



Bild 6.9: Nummerierung der Modellzonen für die folgenden Bilder

(1) Spontane Aufsaugung sowie kapillarer Schwellendruck

Die Eigenarten der Verdrängungsprozesse von Luft durch Wasser und von Wasser durch Luft (siehe auch obiger Stichpunkt „Kapillardruck“) werden in diesem Beispiel in zwei Berechnungsvariationen nachvollzogen. Dabei sind das Berechnungsmodell und sein rechtsseitiger Rand stets mit dem zu verdrängenden Fluid zu 100% gesättigt, während am linksseitigen Modellrand das verdrängende Fluid ansteht. Die aufgebrauten Drücke sind zunächst mit 2 MPa für das an der jeweiligen Position bzw. am Modellrand vorliegende Fluid überall identisch. Zum ursprünglichen Zeitpunkt der Durchführung der Simulationen sind noch keine komplexeren Kapillardruckfunktionen nach *van Genuchten* o.ä. zum Einsatz gekommen, sondern lediglich die vereinfachte, lineare Beziehung

$$p_{cap}(S_l) = p_{cap,max} \cdot (1 - S_l) \quad (6.7)$$

mit

p_{cap} Kapillardruck in MPa , Konvention hier: $p_{cap} \geq 0 MPa$,

S_l Sättigung der Flüssigphase, dimensionslos,

$p_{cap,max}$ maximaler Kapillardruck in MPa , $p_{cap,max} = p_{cap}(0)$,

wobei hier in der Regel $p_{cap,max} = 1 MPa$ gewählt worden ist. Beide Phasen sind in den durchzuführenden Simulationen hinreichend permeabel, wobei die exakten Angaben der Relativpermeabilitätsfunktionen für das mit diesem Modellbeispiel verfolgte Demonstrationsziel irrelevant sind. Der mit der ersten Variation simulierte Prozess der ausschließlich saugspannungsinduzierten Anziehung von Wasser aus umliegenden Modellbereichen wird *spontane Aufsaugung* genannt, während der mit der zweiten Variation simulierte Prozess des Einpressens von Luft in gesättigte Bereiche, bei dem der kapillare Schwellendruck zu überwinden ist, als *Trocknung* oder *Entwässerung* bezeichnet wird. Bild 6.10 skizziert die beiden Variationen.

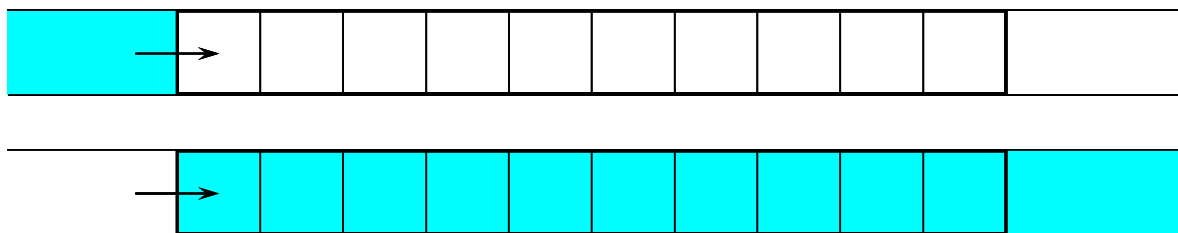


Bild 6.10: Schematische Modellbeschreibungen der beiden Berechnungsvariationen „spontane Aufsaugung“ (oben) und „kapillarer Schwellendruck“ (unten): Saugspannung bzw. Überdruck führen am linksseitigen Rand zu einem mehr oder minder starken Eindringen des anstehenden Fluides ins Modell

In Bild 6.11 ist das Berechnungsergebnis für die erste Variation dargestellt, und der Vorgang der spontanen Aufsaugung kann sehr gut nachvollzogen werden: Zu Beginn herrscht in den zehn ungesättigten Modellzonen hypothetisch ein Porenwasserdruck von $p_l = 1 MPa$ aufgrund eines maximal angesetzten Kapillardruckes von ebenfalls $p_{cap} = 1 MPa$ (in der physikalischen Modellvorstellung ist die Kapillardruck-Sättigungs-Funktion bis zur Stelle $S_l = 0\%$ extrapolierbar), so dass der Porendruckgradient nach der *Darcy*-Gleichung eine modelleinwärtige Flüssigkeitsströmung erzeugt. Mit der steigenden Sättigung sinkt auch der Kapillardruck, und der Porenwasserdruck strebt gegen den durch die rechtsseitige Modellrandbedin-

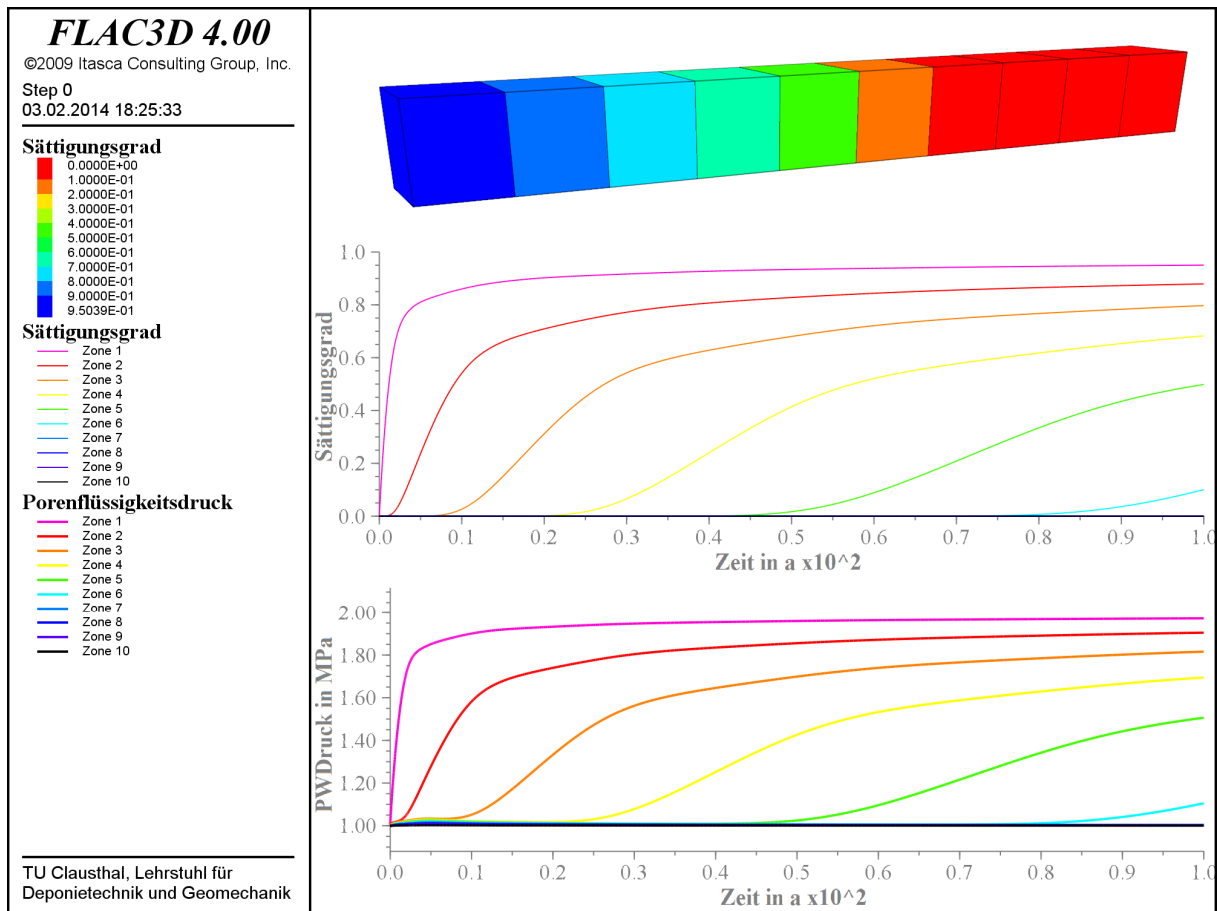


Bild 6.11: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der spontanen Aufsaugung

gung stabil gehaltenen Porengasdruck von $p_g = 2 \text{ MPa}$, so dass der Porenwasserdruckunterschied am linksseitigen Rand abnimmt, während er zwischen den ersten beiden Zonen zunimmt. Auf diese Weise sättigen sich die Modellzonen im Verlauf der Zeit sukzessive und mit fallender Geschwindigkeit auf.

Bild 6.12(a) zeigt das entsprechende Berechnungsergebnis für die zweite Variation. Hier strömt wie erwartet weder Luft in das Modell ein noch Wasser aus dem Modell heraus, da der Kapillardruck für die Randbedingungen auf $p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}$ gesetzt worden ist, so dass der Flüssigkeitsdruck überall $p_l = 2 \text{ MPa}$ beträgt und sein Gradient daher überall verschwindet. Um den Effekt des kapillaren Schwellendruckes zu verdeutlichen, sind zwei modifizierte Berechnungsvariationen durchgeführt worden, deren Ergebnisse in Bild 6.12(b/c) dargestellt sind: In Bild 6.12(b) ist der Gasdruck am linken Modellrand auf $p_l = 2,05 \text{ MPa}$ angehoben worden, während er dort in Bild 6.12(c) auf $p_l = 3,05 \text{ MPa}$ gesetzt worden ist.

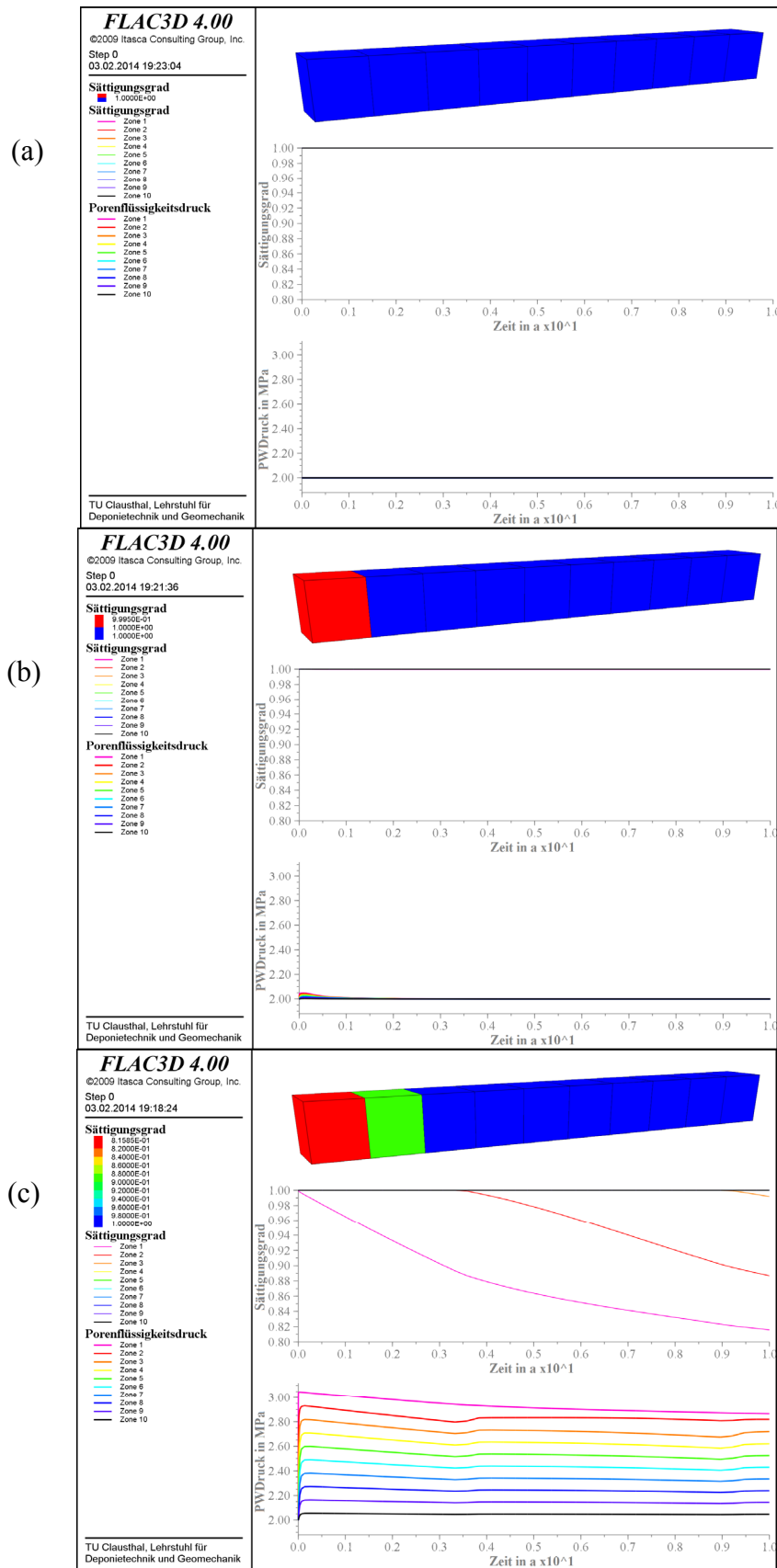


Bild 6.12: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der Trocknung: Gasdruck (a) isobar, (b) unterhalb und (c) oberhalb des Schwellendruckes

Bei den aus TOUGH2 zur Verfügung stehenden Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen beträgt der Kapillardruck im Fall der Vollsättigung $p_{cap}(1) = 0 \text{ MPa}$, so dass genau genommen jeder Gasdruck, der auch nur geringfügig höher als der Flüssigkeitsdruck des vollgesättigten Materials ist, zu einem Eintreten des Gases in das poröse Material führt. Streng genommen beträgt der kapillare Schwellendruck in diesen Fällen daher 0 MPa . In der Regel führt aber bereits eine sehr geringe Teilentsättigung zu einem derartig starken Anstieg des Kapillardruckes, dass die Sättigung nicht weiter abnimmt und das Gas aufgrund seiner infolgedessen extrem geringen Relativpermeabilität quasi am weiteren Eindringen gehindert wird, wenn sein Druck nicht signifikant erhöht gegenüber dem Porenwasserdruck im vollgesättigten Material ist. Daher kann hier dennoch von einem kapillaren Schwellendruck $\gg 0 \text{ MPa}$ im Sinn einer hydraulischen Strömungsbarriere gesprochen werden. Wird dieser Schwellendruck vom anstehenden Gas überschritten, laufen die Entsättigungsprozesse deutlich schneller ab und pflanzen sich bedingt durch die nun erhöhte relative Gaspermeabilität auch schneller im Material fort. Diese beschriebenen Abläufe sind sehr gut in den Bildern 6.12(b/c) zu erkennen. Dazu sei angemerkt, dass der maximale Kapillardruck für Bild 6.12(b) auf $p_{cap,max} = 100 \text{ MPa}$ heraufgesetzt worden ist, um den für gewöhnlich verstärkten Anstieg des Kapillardruckes bei geringer Teilentsättigung zu modellieren.

(2) Simulation eines Aufsättigungsprozesses

Das Zehnzonenmodell stellt hier ein vereinfachtes untertägliches Dammbauwerk dar, das zu Beginn bei Atmosphärendruck ungesättigt ist (inklusive der Modellränder), und an dessen linksseitigem Rand ab dem Zeitpunkt $t = 0$ Wasser mit einem um 2 MPa erhöhten Druck ansteht. Bild 6.13 zeigt das verwendete Modell schematisch. Die Porosität beträgt $\phi = 10\%$ und die absolute Permeabilität $K = 10^{-18} \text{ m}^2$. Bei einem Ansatz von 0% für die Restsättigung-



Bild 6.13: Schematische Modellbeschreibung der Berechnungsvariation „Aufsättigung“: Druckunterschiede zwischen den beiden Modellrändern führen linksseitig zu einem Eindringen des Wassers ins Modell und rechtsseitig zu einem Ausströmen der verdrängten Luft und später auch des nachgeströmten Wassers

gen der beiden Phasen wird erwartet, dass der Sättigungsgrad im Dammbauwerk im Verlauf des Aufsättigungsprozesses auf den Maximalwert von 100% ansteigt.

Für die Relativpermeabilität der Flüssigphase ist die Gleichung (5.30) nach *Burdine/Corey*, $K_{rel;l} = S_l^4$, angesetzt worden (mit $S_{l;eff} = S_l$), während die relative Gaspermeabilität und der Kapillardruck variiert worden sind: Mit jeweils zwei unterschiedlichen Einstellungen, die in Tabelle 6.1 zusammengestellt sind, sind insgesamt vier Berechnungsvariationen durchgeführt worden. Für die durch die Randbedingungen modellierten Hohlräume ist dabei stets ein Kapillardruck von $p_{cap} = 0 \text{ MPa}$ angesetzt worden.

$K_{rel;g}(S_g):$	$p_{cap}(S_l):$	vernachlässigt: $p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}$	linear: Gl. (6.7) mit $p_{cap,max} = 0,5 \text{ MPa}$
maximal mobil: $K_{rel;g} \equiv 1$		erste Variation	dritte Variation
nach <i>Burdine/Corey</i> : Gl. (5.30) $K_{rel;g} = S_g^3(2 - S_g)$		zweite Variation	vierte Variation

Tabelle 6.1: *Verwendete Ansätze für die relative Gaspermeabilität und den Kapillardruck im Rahmen der vier Aufsättigungs-Berechnungsvariationen*

Die Resultate der vier Aufsättigungsberechnungen sind in den Bildern 6.14 bis 6.17 abgebildet. Beobachtungen und qualitative Analysen ergeben:

- Bild 6.14: Aufgrund der maximal möglichen Mobilität des Gases und der im Vergleich dazu geringeren Mobilität der viskoserer Flüssigkeit (Wasser mit gelöster Luft) kann ein Porendruck durch die Gasphase schneller abgebaut werden als die Flüssigphase ihn aufbauen kann. Daher bildet sich trotz des um 2 MPa erhöhten anstehenden Druckes am linksseitigen Modellrand nur ein äußerst geringer Porendruckgradient im Modell aus, welcher wegen des vernachlässigten Kapillardruckes für beide Fluide gleichermaßen gilt. Somit besteht ein Porenflüssigkeitsdruckgefälle lediglich an der Wassereintrittsstelle, und nur die erste Modellzone sättigt sich mit der Zeit gleichmäßig auf, ohne dass sich dabei der Porendruckgradient an irgendeinem Ort signifikant ändert. Erst sobald die erste Modellzone vollständig aufgesättigt ist, kann sich dort ein größerer Porenflüssigkeitsdruck mit einem Zahlenwert zwischen denjenigen der Flüssigphase am linken Modellrand ($2,1013 \text{ MPa}$) und der Gasphase im Modell ($\approx 0,1013 \text{ MPa}$) ausbilden. Mit einem Porenflüssigkeitsdruckgefälle zwischen der ersten und der zweiten Modell-

zone läuft der Aufsättigungsprozess dort nun analog zu dem vorangehenden weiter, wobei der dort vergleichsweise geringere Porendruckgradient diesen Prozess verlangsamt. Dieser Ablauf wiederholt sich für alle folgenden Zonen des Berechnungsmodells, wobei sich stets ein linearer Porenflüssigkeitsdruckverlauf zwischen dem linksseitigen Rand und der Modellzone mit der Phasenfront ausbildet. Dabei werden die in den Graphen zu erkennenden numerisch bedingten Diskontinuitäten in den Drücken erhalten, da sich diese Phasenfront aufgrund der diskreten räumlichen Struktur des Modells nicht kontinuierlich fortbewegen kann, sondern von Zone zu Zone „springt“.

Anm.: Da TOUGH2 die Modellzonen an ihrem Stützpunkt, d.h. dem FLAC^{3D}-Zentroid, positioniert, besteht der lineare Verlauf beispielsweise bei der Aufsättigung der zweiten Zone zwischen den Stellen $x = 0\text{ m}$ und $1,5\text{ m}$, so dass sich für die erste Modellzone an der Stelle $x = 0,5\text{ m}$ nicht etwa $p_l \approx 1\text{ MPa}$, sondern der im Bild erkennbare Zahlenwert nahe dem rechnerisch überschlagenen Zahlenwert von $p_l = 1,43\text{ MPa}$ ergibt.

- Bild 6.15: Der Aufsättigungsprozess läuft ähnlich zu dem aus der ersten Berechnungsvariation ab, nur dass mit steigender Sättigung in einer Modellzone die Gasmobilität abnimmt. Einerseits strömt auf diese Weise weniger Gas in die folgende Zone ab, so dass der Porendruckgradient sich in allen ungesättigten Zonen noch flacher ausbildet als in der ersten Variation, andererseits steigt der Porendruck in der sich aktuell aufsättigenden Zone nun an und erhöht somit das Porendruckgefälle zur folgenden Zone hin für beide Fluide. Noch bevor die aktuell betrachtete Modellzone vollständig aufgesättigt worden ist, strömt daher bereits Flüssigkeit in die folgende Zone weiter, da überdies die relative Flüssigkeitspermeabilität in der aktuellen Zone mittlerweile deutlich angewachsen ist. Aufgrund dieses Abstroms steigt die Sättigung in der aktuellen Zone somit auch langsamer an. Mit Blick auf die für die vollständige Aufsättigung des Dammbauwerks benötigte Gesamtzeit im Vergleich zur vorangehenden Berechnungsvariation hat die verminderte Gasmobilität einen verlangsamen Einfluss auf das Ergebnis, der auch durch das geringfügig vorzeitige Vordringen der Flüssigkeitsfront nicht kompensiert wird. Wie aus Bild 6.15 ersehen werden kann, wird die Gasmobilität ab einem Sättigungsgrad von etwa 90% derartig gering, dass das Restgas des gesamten Modells nur noch mit Mühe vom einströmenden Wasser herausgedrängt werden kann. Bei Fortführung der Simulation ergibt sich eine Aufsättigungsdauer für das gesamte Dammbauwerk von etwa 470 Jahren.

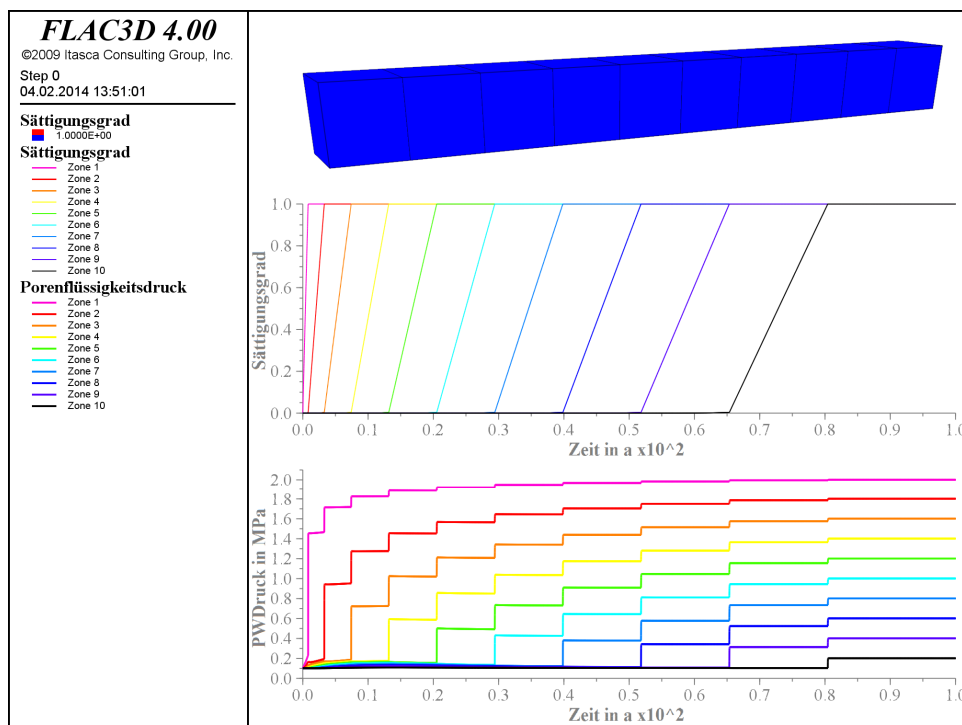


Bild 6.14: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der ersten Aufsättigungs-Berechnungsvariation ohne Kapillardruck und mit maximal mobiler Gasphase

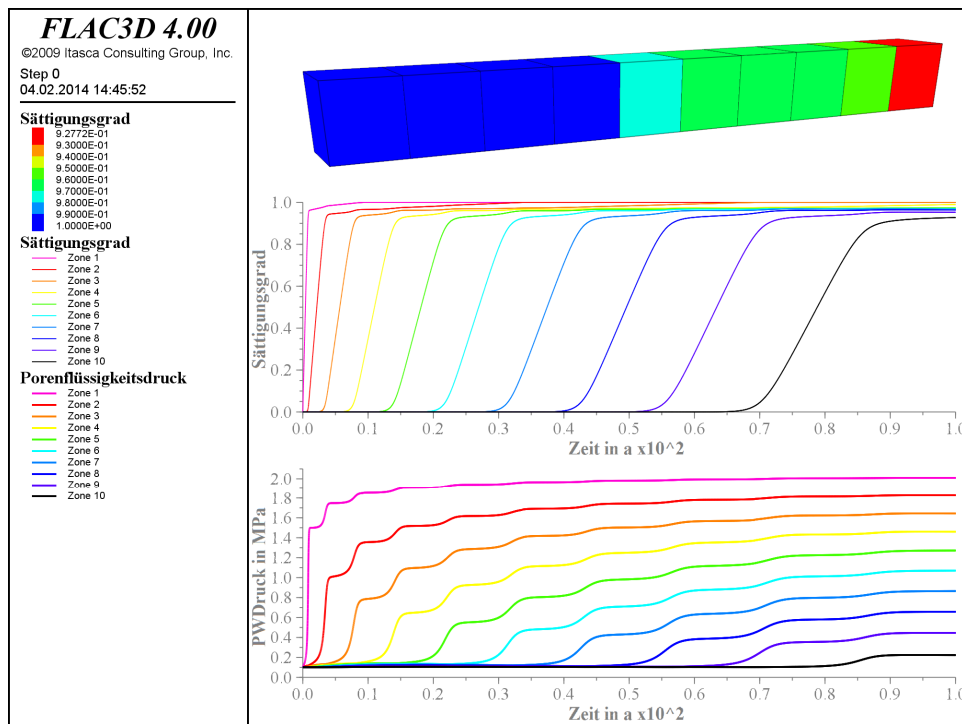


Bild 6.15: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der zweiten Aufsättigungs-Berechnungsvariation ohne Kapillardruck und mit relativer Gaspermeabilität nach Burdine/Corey

- Bild 6.16: Bei einem primären Gasdruck von $p_g = 0,1013 \text{ MPa}$ und einem daraus folgenden hypothetischen Flüssigkeitsdruck von annähernd $p_l = p_g - p_{cap,max} \approx -0,4 \text{ MPa}$ im ungesättigten Dammbauwerk (Saugspannung) liegt ein im Vergleich zu den vorangehenden Berechnungsvariationen erhöhtes Flüssigkeitsdruckgefälle am linksseitigen Modellrand und damit im Simulationsverlauf auch an der sich propagierenden Phasengrenzfront vor. Der Aufsättigungsprozess wird durch diese erhöhten Druckgradienten und die somit erhöhten Strömungsgeschwindigkeiten erheblich beschleunigt. Im Verlauf der Aufsättigung einer Modellzone steigt wie bisher auch die relative Flüssigkeitspermeabilität, und da sich im Gegensatz zur vorangehenden Berechnungsvariation der Druckgradient für die Flüssigphase nicht erst aufbauen muss, sondern durch die Saugspannung in der folgenden ungesättigten Zone bereits besteht, strömt die Flüssigkeit auch entsprechend früher und schneller in die Folgezone. Der Sättigungsanstieg in der aktuell betrachteten Zone verlangsamt sich dabei wie bereits in der zweiten Variation – mit Ausnahme der zehnten Modellzone, wo ein Abstrom aufgrund der dahinter nicht mehr bestehenden Saugspannung erst bei Erreichen des Atmosphärendrucks, also bei Vollsättigung, möglich ist.
- Bild 6.17: Hier sind die kombinierten Effekte aus den Bildern 6.15 und 6.16 zu erkennen. Die beschleunigenden und verlangsamenen Faktoren der beiden vorangehenden Berechnungsvariationen heben sich mit Blick auf eine Fast-Vollsättigung ($S_l > 90\%$) mehr oder minder auf, wobei der Effekt der erschwerten Verdrängung des Restgases aufgrund der stark abnehmenden Gasmobilität auch hier zu einer Gesamtaufsattdauer ($S_l = 100\%$) von etwa 465 Jahren führt.

(3) Simulation eines Trocknungsprozesses

Das dritte Szenario ist dem zweiten Szenario vom Aufbau her sehr ähnlich, nur ist hier das in Bild 6.18 schematisch dargestellte untertägige Dammbauwerk, das zum Abdichten eines Endlagerbereiches errichtet worden ist, von Beginn an bei Atmosphärendruck vollgesättigt, und am linksseitigen Modellrand steht ab dem Zeitpunkt $t = 0$ durch Behälterkorrosion entstandenes Gas (hier modulbedingt: Luft) mit einem um 2 MPa erhöhten Druck an. Die in Tabelle 6.2 zusammengestellten Materialkennwerte und die variierten Ansätze für Relativpermeabili-

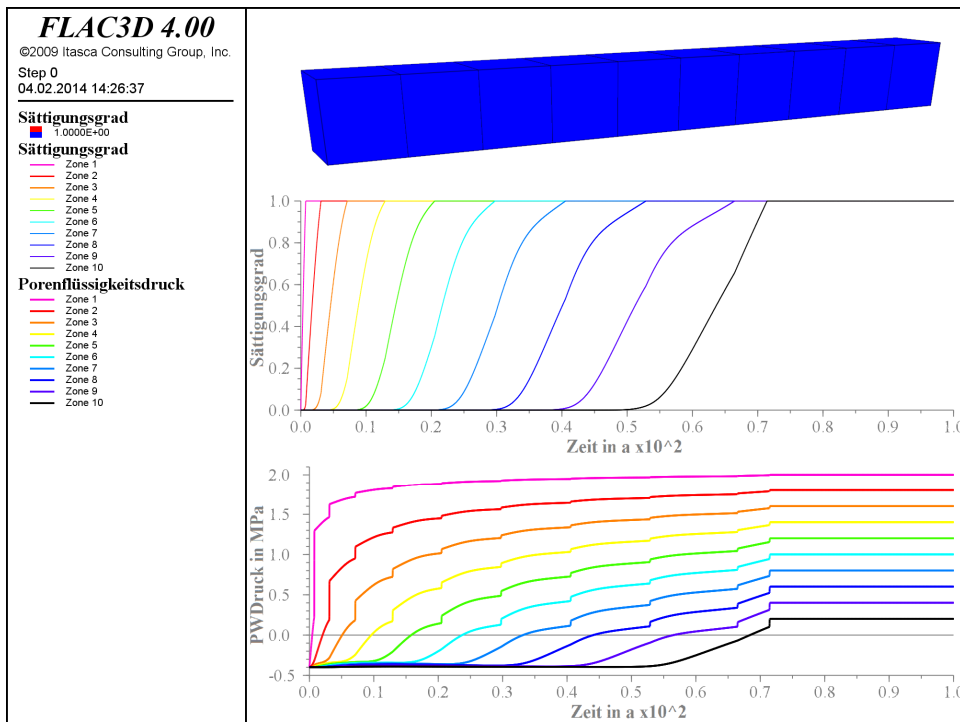


Bild 6.16: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der dritten Aufsättigungs-Berechnungsvariation mit linearer Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung und maximal mobiler Gasphase

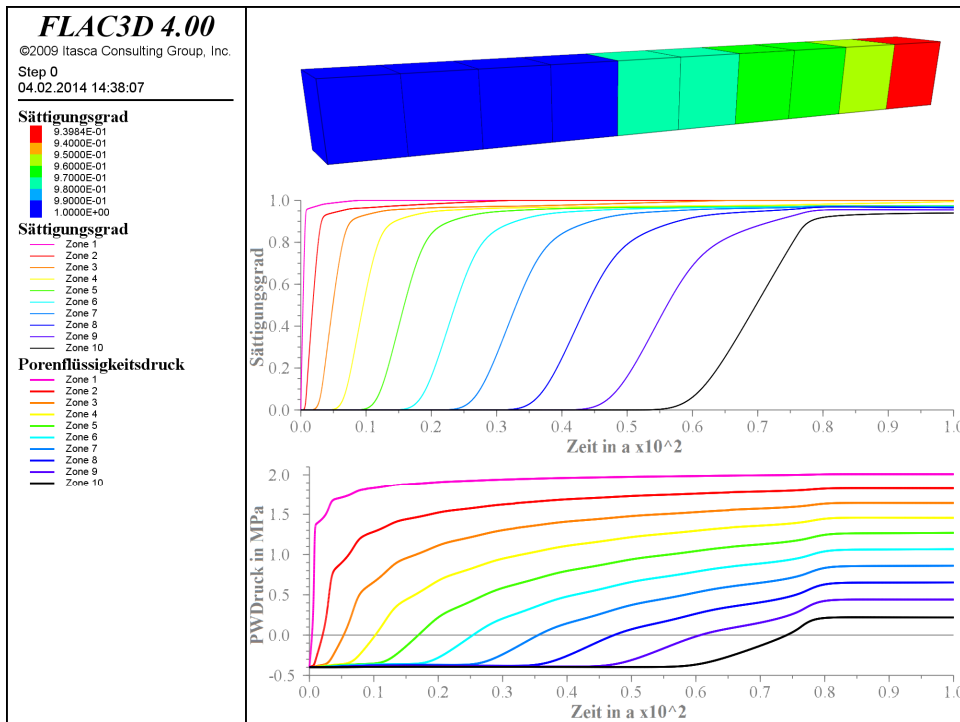


Bild 6.17: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der vierten Aufsättigungs-Berechnungsvariation mit linearer Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung und relativer Gaspermeabilität nach Burdine/Corey



Bild 6.18: Schematische Modellbeschreibung der Berechnungsvariation „Trocknung“: Druckunterschiede zwischen den beiden Modellrändern führen linksseitig zu einem Eindringen der Luft ins Modell und rechtsseitig zu einem Ausströmen des verdrängten Wassers und später auch der nachgeströmten Luft

täten und Kapillardruck sind mit Ausnahme vom Zahlenwert für $p_{cap,max}$ dieselben wie im vorangehenden Beispiel, wobei hier nur drei der vier möglichen Kombinationen der Ansätze verwendet worden sind. Aufgrund der angesetzten Flüssigkeitsrestsättigung von 0% ist ein zum Aufsättigungsprozess ähnlicher Verlauf für die Wasserverdrängung erwartet worden. Die Berechnungsergebnisse werden allerdings zeigen, dass die Vertauschung der Fluide aufgrund deren unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften, die bis dato unberücksichtigt geblieben sind (und insbesondere im Einphasenfluss auch nicht berücksichtigt zu werden brauchten), einen signifikanten Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat.

$K_{rel,g}(S_g):$	$p_{cap}(S_l):$	vernachlässigt: $p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}$	linear: Gl. (6.7) mit $p_{cap,max} = 10 \text{ MPa}$
maximal mobil: $K_{rel,g} \equiv 1$		zweite Variation	dritte Variation
nach Burdine/Corey: Gl. (5.30) $K_{rel,g} = S_g^3 (2 - S_g)$		erste Variation	

Tabelle 6.2: Verwendete Ansätze für die relative Gaspermeabilität und den Kapillardruck im Rahmen der drei Trocknungs-Berechnungsvariationen

Zunächst ist bereits in Abschnitt 5.4 im Rahmen eines ähnlichen Beispiels mit im ungekoppelten Fall identischer mathematischer Beschreibung mit Gleichung (5.53a) eine lineare Porendruckverteilung für den stationären Zustand bei einer Sättigung von 100% (Einphasenfluss) hergeleitet worden. Aus den Bildern 6.14 und 6.16 kann ersehen werden, dass in den vorangehenden Berechnungen auch stets eine lineare Porenflüssigkeitsdruckverteilung am Ende der Berechnungen bei Vollsättigung erhalten worden ist. Bei der mathematischen Herleitung der Gleichung ist allerdings von einer räumlichen und zeitlichen Konstanz der auftretenden Parameter und damit insbesondere von ihrer Unabhängigkeit vom Porendruck ausgegangen worden, was im Fall eines strömenden Gases jedoch keine realistische Näherung darstellt. Bild 6.19 zeigt die Porengasdruckverteilung für den stationären Endzustand des Trocknungsprozesses.

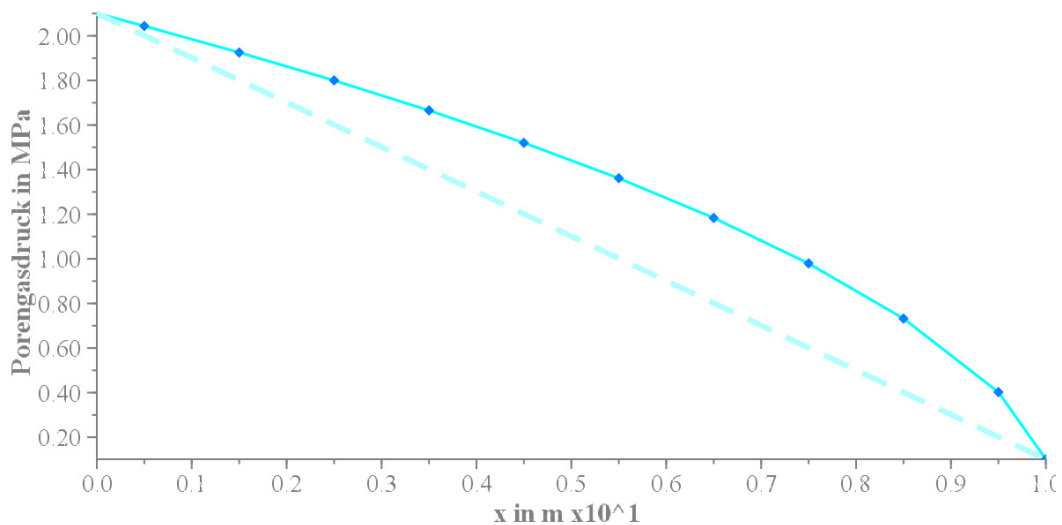


Bild 6.19: Porenwasserdruck im stationären Zustand nach der Trocknung (mit linearem Vergleichsgraphen zur Visualisierung des gekrümmten Kurvenverlaufs)

Die in TOUGH2 implementierten Gleichungen (5.10) und (5.12) beziehen sich auf die Massen der Fluide. Die Bilanzgleichung (5.10) besagt für dieses Modellbeispiel, dass bei einem stationären Zustand mit nur einer Phase in jeder Zone dieselbe Fluidmasse auf der rechten Seite hinausströmen muss wie auf der linken Seite in sie hereinströmt, d.h. $q_{m,\varphi} \equiv const.$.

Wird bei der Darcy-Strömungsgleichung (5.12) eine einzelne Phase fokussiert und dabei die Erdbeschleunigung vernachlässigt, lautet die Massenstromdichte für diese Phase mit beiden enthaltenen Komponenten und mithilfe von Gleichung (5.14):

$$q_{m,\varphi} = \sum_{\kappa} q_{m,\kappa\varphi} = -\frac{K}{\eta_{\varphi}(p_{\varphi})} \cdot K_{rel,\varphi}(S_l) \cdot \rho_{\varphi}(p_{\varphi}) \cdot \nabla p_{\varphi} \quad (6.8)$$

Während bei Normaltemperaturen der Einfluss des Druckes auf die Viskositäten beider fluiden Phasen sowie auf die Wasserdichte (\rightarrow Kompressibilität) eher schwach ausgeprägt ist, hängt die Dichte von Luft-Wasserdampf-Gemischen gemäß ihrer Implementierung in TOUGH2 signifikant vom Gasphasendruck ab. Könnte aus Gleichung (6.8) für den stationären Zustand bei Vollsättigung auf diese Weise noch $\nabla p_l \approx const.$ gefolgert werden, so ergibt sich für den vorliegenden ungesättigten Fall lediglich $\rho_g(p_g) \cdot \nabla p_g \approx const.$. In der Folge muss hier an Stellen mit erhöhtem Porengasdruck (und daher mit erhöhter Luftdichte) die Änderung des Porengasdruckes dementsprechend verringert sein. Anders formuliert: Aufgrund der Massenerhaltung muss das aus jeder Modellzone ausströmende Luftvolumen wegen des Dichteunterschiedes größer sein als das im gleichen Zeitraum einströmende Volumen, so

dass es infolgedessen schneller herausströmt. Die Proportionalität von Volumenstrom (Filtergeschwindigkeit) und Porendruckgradient erklärt somit den Kurvenverlauf in Bild 6.19.

Die Resultate der drei Trocknungsberechnungen mit den Ansätzen aus Tabelle 6.2 auf Seite 120 sind in den Bildern 6.20 bis 6.23 abgebildet. Beobachtet und interpretiert werden kann hierbei folgendes:

- Bild 6.20: Zunächst bildet sich aufgrund der geringen Kompressibilität des Wassers sehr schnell eine lineare Verteilung des Porendruckes im gesamten Berechnungsmodell inklusive den Rändern (mit hypothetischen Flüssigkeitsdrücken gleich den Gasdrücken) aus. Das Einströmen der Luft vom linksseitigen Modellrand aus senkt die Sättigung in der ersten Modellzone und damit auch die Relativpermeabilität der Flüssigphase, so dass in allen folgenden Zonen die Porendrucke wieder zu sinken beginnen. Die Relativpermeabilität der Gasphase steigt hingegen mit der Entsättigung, so dass geringste Luftmengen in die zweite Modellzone gelangen – zunächst in der Flüssigphase gelöst – und sich dort allmählich aufsummieren, bis sich eine separate Gasphase ausbildet. Das trotz seiner noch geringen Relativpermeabilität mobile Gas führt in Verbindung mit dem wenig kompressiblen Porenwasser daraufhin wieder zu einer Rücksetzung des Porendruckes auf die lineare Verteilung von kurz nach Beginn des Verdrängungsprozesses. Des Weiteren verlangsamt sich der Entsättigungsprozess in der ersten Modellzone aufgrund des nunmehr verstärkten Gasabstroms in die zweite Zone. Für die übrigen Modellzonen wiederholt sich der beschriebene Prozessablauf in ähnlicher Weise mit dem Unterschied, dass sich in den Zonen mit einer Gasphase nun ein nichtlinearer Porendruckverlauf analog zu Bild 6.19 ausbildet. Insgesamt läuft der Trocknungsprozess aufgrund der bereits generell geringeren Mobilität der Flüssigphase deutlich langsamer ab als der Aufsättigungsprozess – eine vollständige Entsättigung des Modells wird erst nach 20.600 Jahren erreicht.
- Bild 6.21: Wie im vorangehenden Beispiel besteht vom linken Modellrand aus gesehen ein Porendruckgefälle, das einen modelleinwärtigen Gasstrom induziert. Allerdings wird der Gasstrom in diesem Beispiel in seinem weiteren Verlauf nicht mehr durch eine sehr geringe Relativpermeabilität blockiert, sondern ist von Beginn an maximal mobil und erreicht auf diese Weise äußerst schnell den rechtsseitigen Modellrand. Dabei bildet sich auch modellweit direkt die stationäre, nichtlineare Porendruckverteilung aus. Das gesamte Berechnungsmodell ist nach 18.100 Jahren vollständig entsättigt.

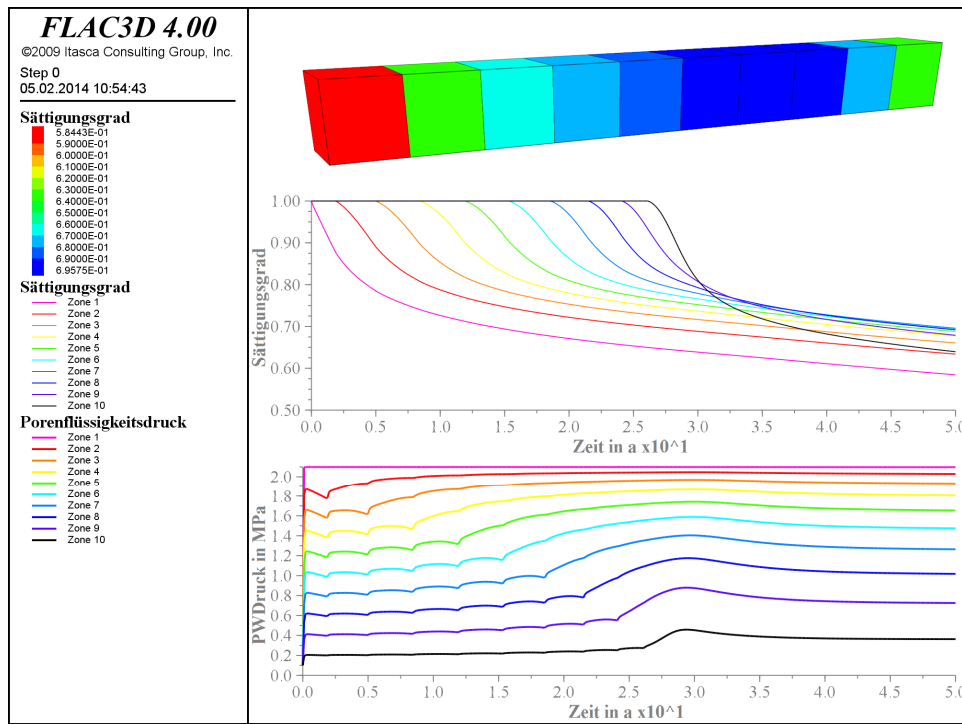


Bild 6.20: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der ersten Trocknungs-Berechnungsvariation ohne Kapillardruck und mit relativer Gaspermeabilität nach Burdine/Corey

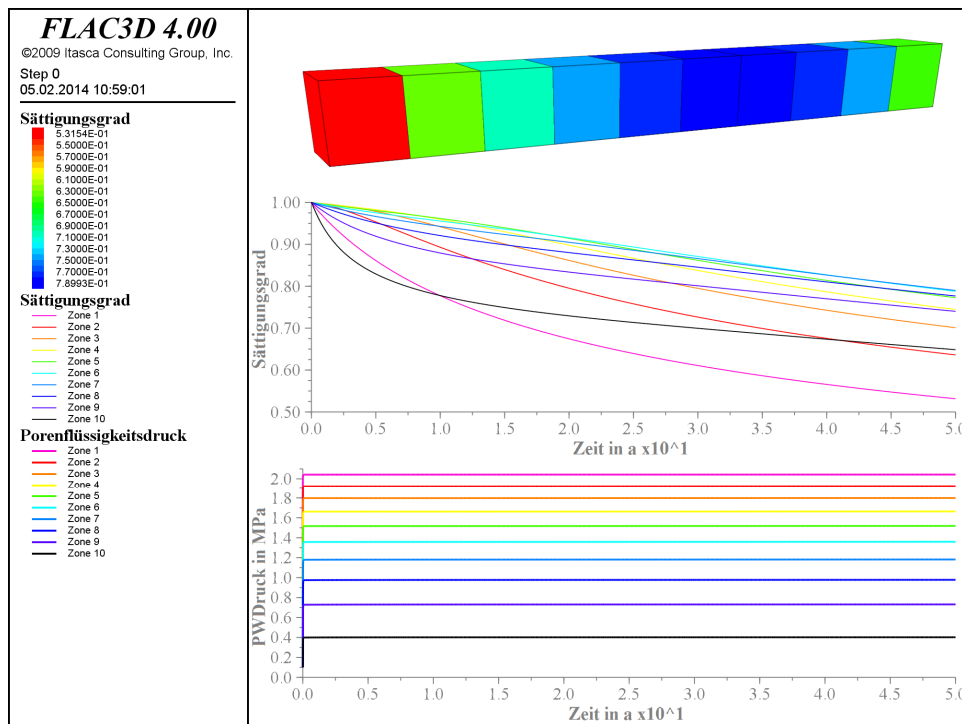


Bild 6.21: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der zweiten Trocknungs-Berechnungsvariation ohne Kapillardruck und mit maximal mobiler Gasphase



- Bilder 6.22 und 6.23: Die mit maximaler Mobilität durch das Berechnungsmodell strömende wasserverdrängende Luft führt bereits sehr schnell modellweit zu einem signifikanten Anstieg der Kapillardrücke und damit zu einer Absenkung der Flüssigkeitsdrücke. Dabei wird wie in der vorangehenden Berechnungsvariation unverzüglich die nichtlineare Gasdruckverteilung des stationären Zustands erreicht und auch aufrechterhalten. Da der Druckunterschied zwischen den beiden Phasen (d.h. der Kapillardruck) zunächst jedoch aufgrund der aufgebrachten Randbedingungen den Zahlenwert 2 MPa nicht überschreitet, kann auch der Sättigungsgrad nach Gleichung (6.7) mit $p_{cap,max} = 10 \text{ MPa}$ die Marke von 80% nicht unterschreiten, so dass sich scheinbar im Gegensatz zu den vorangehenden Berechnungsvariationen ein stabiler Teilsättigungszustand im Dammbauwerk einstellt. Im weiteren Simulationsverlauf sinken der Sättigungsgrad und damit auch der Porenflüssigkeitsdruck allerdings gleichförmig in allen zehn Zonen ab, bis nach 53.800 Jahren das Dammbauwerk vollständig entsättigt ist. Aufgrund des eigentlich bereits nach etwa 700 Jahren erreichten stationären Zustands für die Porendrücke und Sättigungen – sobald überall ein Porenwasserdruck in Höhe des rechtsseitigen Randwertes erreicht ist, kann die Porenflüssigkeit nicht mehr eigenständig aus dem Modell strömen – wird davon ausgegangen, dass durch das Einströmen von Luft und das Ausströmen von Luft und Wasserdampf die Flüssigphase allmählich durch Verdunstung abgetragen wird und daher die Sättigung und der Porenflüssigkeitsdruck abnehmen. Da die Option der Aufbringung einer Luft-Wasserdampf-Randbedingungszone im FTK-Simulator im Rahmen des Forschungsvorhabens aber als weniger relevant angesehen und aus diesem Grund auch nicht implementiert worden ist, konnte keine Vergleichssimulation unter Zustrom eines gesättigten Luft-Dampf-Gemisches durchgeführt werden, um zu überprüfen, ob der scheinbar stationäre Zustand in diesem Fall auch tatsächlich stationär ist.

Anmerkung: In den Bildern 6.20 und 6.21 zu den Berechnungen mit einem vernachlässigten Kapillardruck fällt des Weiteren auf, dass sich die hinteren Modellzonen schneller entsättigen als die vorangehenden Zonen, sobald das eindringende Gas die zehnte Modellzone erreicht hat. Dieses Phänomen kann mit den aus Gleichung (6.8) erhaltenen Proportionalitätsbeziehungen (6.9) für die beiden fluiden Phasen begründet werden:

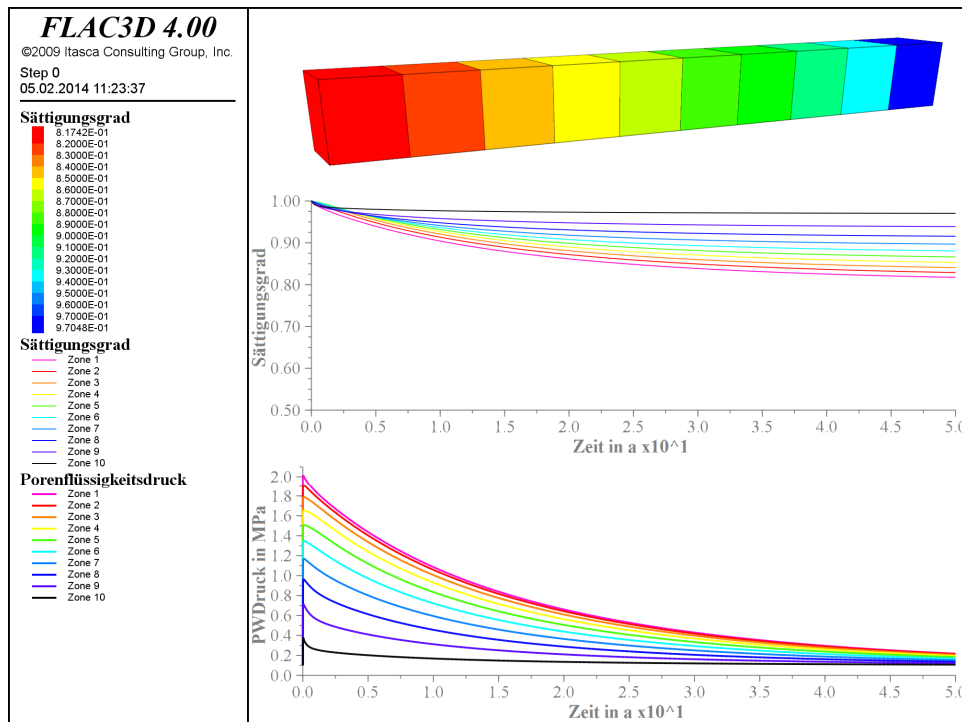


Bild 6.22: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der dritten Trocknungs-Berechnungsvariation mit linearer Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung und maximal mobiler Gasphase

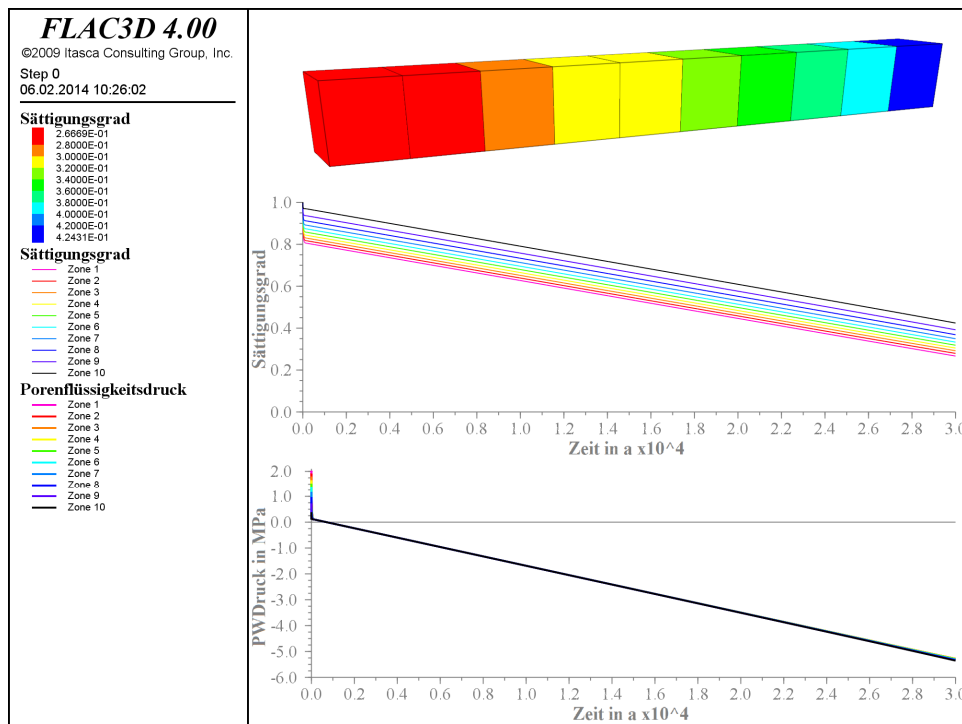


Bild 6.23: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der dritten Trocknungs-Berechnungsvariation mit linearer Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung und maximal mobiler Gasphase – Langzeitentwicklung (30.000 Jahre)



$$q_{m;l} \sim K_{rel;l}(S_l) \cdot |\nabla p| \quad \text{sowie} \quad q_{m;g} \sim K_{rel;g}(S_g) \cdot \rho_g(p) \cdot |\nabla p| \quad (6.9)$$

Die Relativpermeabilitäten steigen dabei nach den Gleichungen (5.30) mindestens kubisch mit den entsprechenden Fluidsättigungen an und besitzen daher ein größeres Gewicht in den Beziehungen (6.9). Aus den Bildern 6.20 und 6.21 ist ersichtlich, dass die Porendruckverteilung einen nichtlinearen Verlauf wie in Bild 6.19 besitzt und folglich mit einer steigenden Ortskoordinate $x \rightarrow 10m$ der Absolutbetrag des Druckgradienten $|\nabla p|$ ansteigt und die Gassichte $\rho_g(p)$ abnimmt. Zum Zeitpunkt des Gasphasendurchstoßes nimmt außerdem für $x \rightarrow 10m$ die Gassättigung ab und die Flüssigkeitssättigung zu. Den Beziehungen (6.9) zufolge nimmt somit der Fluidstrom der Flüssigphase zum rechtsseitigen Modellrand hin stark zu und derjenige der Gasphase ab, was bedeutet, dass mehr Wasser herausströmt und mehr Gas hineinströmt. Diese qualitative Abschätzung ist selbst dann noch gültig, wenn sich die Sättigungen von zwei rechtsseitigen Modellzonen auf die beschriebene Weise ausnivelliert haben ($K_{rel;p}$ ortskonstant \rightarrow würde der Flüssigkeitsstrom $q_{m;l}$ und damit $|\nabla p|$ in Strömungsrichtung abnehmen, so würde der Gasstrom $q_{m;g}$ ebenfalls abgesenkt werden, d.h. die Fluidmassen würden sich in Richtung des rechten Modellrandes aufstauen und dort die Drücke sowie die Druckgradienten ansteigen lassen im Widerspruch zum fallenden $|\nabla p|$).

(4) Vernachlässigung phasenfremder Komponenten bei der Simulatorinterkommunikation

Wie bereits im einführenden Abschnitt 6.3.1 erwähnt, ist bei der initialen Implementierung der Zweiphasenflussprozesse in den FTK-Simulator ein Fehler durch die Vernachlässigung von sehr geringen Zahlenwerten im Zusammenhang mit der Kommunikation zwischen TOUGH2 und FLAC^{3D} entstanden. Im Gegensatz zu FLAC^{3D}, bei dem beim hydraulischen Phasenzustand lediglich zwischen vollgesättigt und teilgesättigt (inklusive vollständig ungesättigt) unterschieden wird, existieren in den Zweiphasenflussmodulen von TOUGH2 darüber hinaus noch für den Zustand der vollständigen Sättigung oder Entsättigung Unterschiede hinsichtlich der im entsprechenden Fluid vorliegenden phasenfremden Komponenten, also für das EOS-Modul 3 Wasserdampf und im Wasser gelöste Luft. Diese unterschiedlichen Zustände werden in TOUGH2 mit der Primärvariable des Luftmassenanteils am vorliegenden Fluid beschrieben, der unter Normalbedingungen ($p_g = 0,1013 \text{ MPa}$; $T = 20^\circ\text{C}$) im vollge-

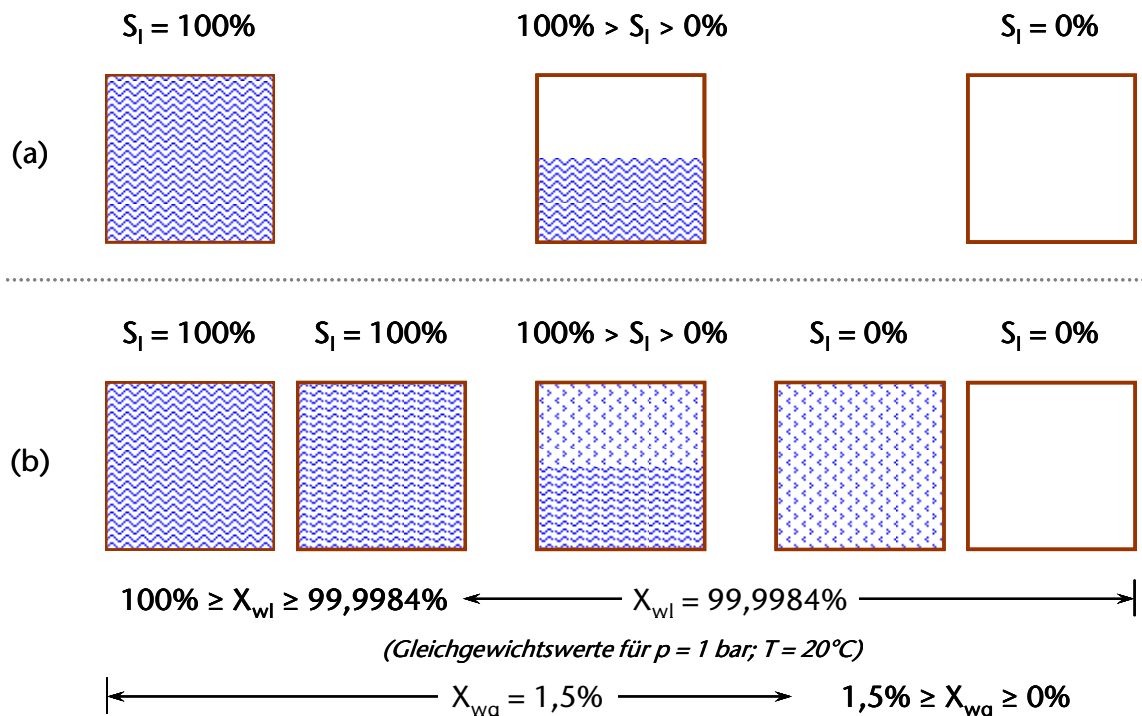


Bild 6.24: Unterteilung der Phasenzustände (a) in FLAC^{3D} (Einhassenfluss mit Teilsättigung) und (b) in TOUGH2 (Zweiphasenfluss, mit Zahlenwerten für das EOS-Modul 3 mit den Komponenten Wasser und Luft) – mit Angabe der unter Normalbedingungen möglichen Wassermassenanteile

sättigten Fall zwischen $X_{al} = 0\%$ und $0,0016\%$ sowie im ungesättigten Fall zwischen $X_{ag} = 98,5\%$ und 100% liegt. Beim Import der TOUGH2-Berechnungsergebnisse in FLAC^{3D} sind die Zahlenwerte für X_{ap} fälschlicherweise vernachlässigt worden, und beim anschließenden Re-Export der Anfangsbedingungen für die thermohydraulische Berechnung sind folglich die nun ungenauen Zustandswerte nach TOUGH2 übergeben worden. Bild 6.24 veranschaulicht die Phasenzustände für TOUGH2-EOS3. Es ist bereits zu erkennen, dass die Zahlenwerte für die Massenanteile $X_{al} = 1 - X_{wl}$ und X_{wg} der phasenfremden Fluide sehr gering sind, insbesondere für die in der Flüssigphase gelöste Luft – ein Phasenzustand, der verstärkt beim Trocknungsprozess auftritt.

Bild 6.25 zeigt das Resultat für die erste Trocknungs-Berechnungsvariation (siehe Bild 6.20) unter Nichtberücksichtigung der in der Flüssigphase gelösten Luft. Die in Bild 6.20 zu sehenden Kurvenverläufe bleiben zwar tendenziell erhalten, aber zum einen erreicht die Phasenfront in Bild 6.25 verspätet die jeweilige Folgezone, weil sie sich dort erst dann ausbilden

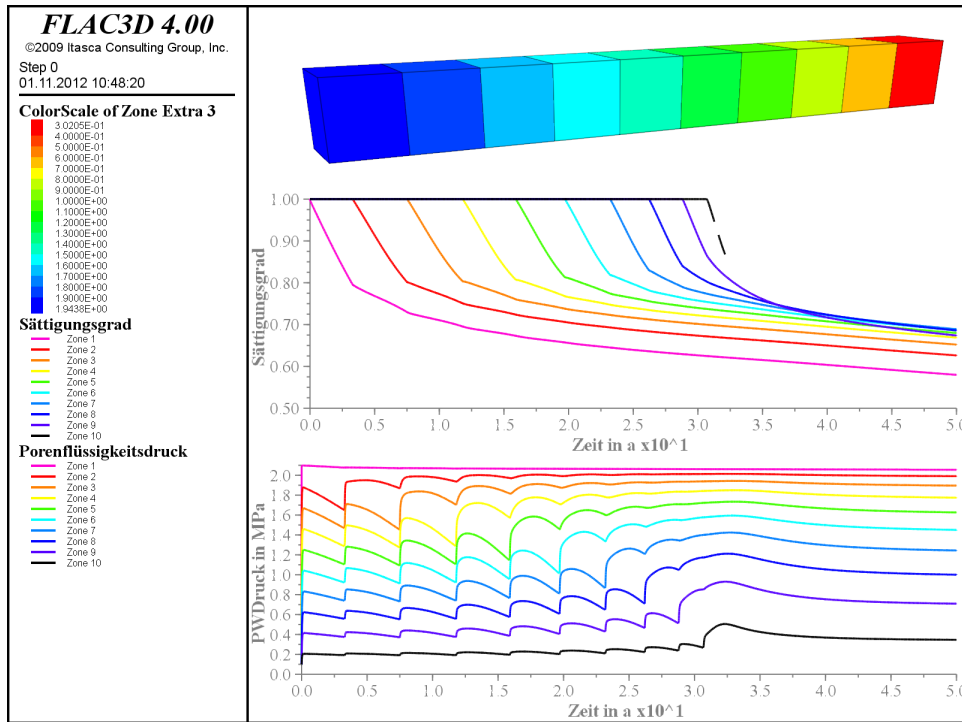


Bild 6.25: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der ersten Trocknungs-Berechnungsvariation ohne Kapillardruck und mit relativer Gaspermeabilität nach Burdine/Corey – Berechnung ohne Berücksichtigung der Luftmassenanteile in der Flüssigphase beim Einlesen der TOUGH2-Ergebnisse

kann, wenn die Gassättigung und damit die relative Gaspermeabilität in der jeweils fokussierten Modellzone hinreichend groß sind, dass die in einem einzigen Zeitschritt in die (bis dato gänzlich luftfreie) Folgezone herübertransportierte Gasmasse zur Neuausbildung einer Gasphase ausreicht. Zum anderen regeneriert sich hier der Porendruck in allen folgenden Modellzonen schneller als in Bild 6.20, da aufgrund derselben Ursache das Gas zum Zeitpunkt der Neuausbildung der Gasphase in der Folgezone bereits mobiler ist und somit der Druckausgleich schneller ablaufen kann.

Deutlicher wird der Einfluss dieses Fehlers in der Implementierung am folgenden Beispiel: Die zweite Trocknungs-Berechnungsvariation ist über einen simulierten Zeitraum von $2.000 d \approx 5,5 a$ mit den beiden unterschiedlichen Kopplungsfrequenzen $f_K = 1/\Delta t_0 = 5/d$ und $f_K = 5 \cdot 10^{-4}/d$ (entspricht einem einzelnen TOUGH2-Aufruf) durchgeführt worden. Bild 6.26 zeigt die erhaltenen Zeitreihen für die Flüssigkeitssättigung, und es kann gesehen werden, dass die Graphen im rechten Bild mit den Graphen aus Bild 6.21 konsistent sind (schneller Vorstoß der Gasphase bis zum rechtsseitigen Modellrand), während im linken Bild auf-

grund der stark erhöhten Kommunikation der Phasenzustände zwischen TOUGH2 und FLAC^{3D} die Gasphase zum selben Endzeitpunkt erst die zweite Modellzone erreicht hat.

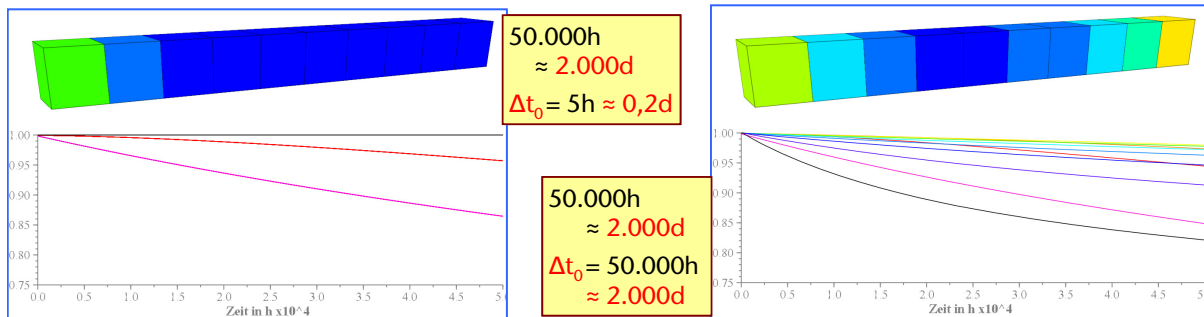


Bild 6.26: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad bei der zweiten Trocknungs-Berechnungsva-riation bei verschiedenen Kopplungsfrequenzen unter Vernachlässigung der Luftmassenanteile in der Flüssigphase bei der Simulatorinterkommunikation

(5) Anisotherme Simulation einer Luftinjektion und -entnahme

Im Hinblick auf eine durch *Rutqvist et al. (2012)* motivierte erweiterte Anwendung des FTK-Simulators auf untertägige Hohlräume für Druckluftspeicher in nichtsalinaren Wirtsgesteinen – mitunter auch als „Kaverne“ bezeichnet – bestand auch der Bedarf einer Demonstration der korrekten Funktionsweise der TOUGH2-internen TH-Kopplung. In einem abgesehen von der Injektionsstelle thermisch und hydraulisch dichten System, das eine solche Druckluftspeicher-kaverne im Idealfall darstellt, führt eine Luftinjektion durch die Injektionsstelle unter üblichen Temperaturen zu einer Zunahme sowohl des Luftdruckes wie auch der Temperatur und eine Luftentnahme entsprechend zu einer Abnahme dieser beiden Größen. Dieser Prozess soll hier an einem einzonigen Modell nachvollzogen und anhand eines analytischen Berechnungsergebnisses verifiziert werden. Des Weiteren stellt dieses Modellbeispiel auch ein geeignetes Testobjekt für die Überprüfung der korrekten Funktionsweise der Aufbringungs-methode für Quellen und Senken im FTK-Simulator dar (Realisierung über Randbedingungs-Zusatzzonen, siehe Abschnitt 6.2.2).

TOUGH2 verwendet zur Berechnung der Luftdichte die thermische Zustandsgleichung (6.10) für ideale Gase, wobei hier aus Gründen der Übersichtlichkeit und Eindeutigkeit auf den Gasphasenindex g verzichtet wird:

$$pV = nRT = mRT/M \quad \Leftrightarrow \quad \rho = pM/RT \quad (6.10)$$



mit

- p Luftdruck in MPa ,
 V Volumen der Gasphase in m^3 ,
 n Stoffmenge der Luftteilchen in mol ,
 R universelle Gaskonstante in $J/(mol \cdot K)$, $R = 8,314 J/(mol \cdot K)$,
 T Temperatur in K ,
 m Luftmasse in kg ,
 M molare Luftmasse in kg/mol , $M = m/n = 0,02896 kg/mol$,
 ρ Luftdichte in kg/m^3 , $\rho = m/V$.

In einem geschlossenen System ist neben R und M auch m konstant, und Änderungen an einer der drei Zustandsgrößen im thermodynamischen Ausgangszustand $p_1; V_1; T_1$ induzieren Änderungen an einer oder beiden anderen Größen. Geschieht die Zustandsänderung reversibel und ohne Wärmeaustausch mit der Umgebung (adiabat), so ändern sich nach der Adiabategleichung (6.11) für ideale Gase *alle* drei Größen gleichzeitig, und mithilfe der beiden Gleichungen (6.10) und (6.11) kann auf Grundlage des thermodynamischen Ausgangszustands der sich aus einer Druck- oder Volumenänderung ergebende Endzustand $p_2; V_2; T_2$ über die aus ihnen folgende Gleichung (6.12) berechnet werden:

$$\{p\} \{V\}^\kappa = const. \quad \Leftrightarrow \quad \{p\}^{1/\kappa} \{V\} = const. \quad (6.11)$$

$$\left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{\frac{1}{\kappa-1}} = \left(\frac{p_2}{p_1}\right)^{\frac{1}{\kappa}} = \left(\frac{V_2}{V_1}\right)^{-1} \quad (6.12)$$

mit

- κ Isentropenexponent für Luft, dimensionslos, $\kappa = 1,391$ (vereinfachend als temperaturunabhängig angenommen).

Mit den geschweiften Klammern werden hier die einheitenlosen Zahlenwerte bezeichnet, also $\{p\} := p/MPa$ und $\{V\} := V/m^3$.

Ein Hohlraum, in den Luft aus- oder eingespeist wird, ist kein geschlossenes System. Wird jedoch angenommen, dass die aus- oder eingespeiste Luft fortwährend denselben variierenden thermodynamischen Zustand besitzt wie die Luft im Hohlraum, kann das System um den eingenommenen Raum der ausgespeisten bzw. der einzuspeisenden Luft oberhalb der Injektions-

stelle erweitert und damit als geschlossen angesehen werden. In dieser Heuristik können die obigen Gleichungen also dennoch zur Berechnung der mit der Aus- oder Einspeisung verbundenen Zustandsänderungen herangezogen werden. Die Druckluftspeicherkaverne kann dann als Teilsystem des auf diese Weise erweiterten Systems betrachtet werden, dessen Volumen konstant bleibt und dessen Luftmasse durch die Aus- oder Einspeisung (= Umverteilung innerhalb des erweiterten Systems) vom Ausgangswert m_1 in den Endwert m_2 überführt wird. Aus Gleichung (6.10) folgt somit aufgrund der angenommenen gleichmäßigen Verteilung von Druck und Temperatur im erweiterten System:

$$\frac{pV}{T} = const. \quad \Leftrightarrow \quad \frac{V_1}{V_2} = \frac{p_2 T_1}{p_1 T_2} \quad \text{für das erweiterte System und} \quad (6.13a)$$

$$\frac{p}{mT} = const. \quad \Leftrightarrow \quad \frac{m_2}{m_1} = \frac{p_2 T_1}{p_1 T_2} \quad \text{für das Teilsystem Kaverne.} \quad (6.13b)$$

Damit gilt $m_2/m_1 = (V_2/V_1)^{-1}$, und zusammen mit Gleichung (6.12) wird schließlich erhalten:

$$p_2 = p_1 \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^\kappa \quad (6.14a)$$

$$T_2 = T_1 \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^{\kappa-1} \quad (\text{in } K) \quad (6.14b)$$

Wird also nun ein Einzonenmodell eines Druckluftspeichers mit einem Fassungsvermögen von $V \equiv 500.000 \text{ m}^3$, Anfangswerten $p_1 = 20 \text{ MPa}$ und $T_1 = 35^\circ\text{C} = 308,15 \text{ K}$ sowie den sich aus der Art der Modellierung ergebenden und ansonsten nicht weiter relevanten Parametern $\phi = 100\%$, $S_l \equiv 0\%$, $X_{ag} \equiv 100\%$ und $p_{cap} \equiv 0 \text{ MPa}$ betrachtet, so ergeben sich bei einer gleichmäßigen Luftentnahme mit einer konstanten Rate von $\hat{q}_m = -6 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ über einen Zeitraum von $\Delta t = 50 \text{ d}$ mithilfe des Luftmassenverhältnisses

$$\frac{m_2}{m_1} = \frac{p_1 VM / RT_1 + \hat{q}_m \Delta t}{p_1 VM / RT_1} = 1 + \frac{\hat{q}_m \Delta t \cdot RT_1}{p_1 VM} = 0,771 \quad (6.15)$$

Absenkungen von Druck und Temperatur auf Endwerte von

$$p_2 = 13,92 \text{ MPa}$$

$$T_2 = 5,16^\circ\text{C}.$$

Eine anschließende Wiedereinspeisung der entnommenen Luft mit einer Rate von $\hat{q}_m = +6 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ über einen Zeitraum von $\Delta t = 50 \text{ d}$ nach einer Ruhephase von zehn Tagen führt zu einer Rückänderung des thermodynamischen Zustands auf die Ausgangswerte. Bild 6.27 zeigt die mit dem FTK-Simulator erhaltenen Berechnungsergebnisse für Luftdruck und Temperatur im zeitlichen Verlauf. Die auf diese Weise erhaltenen Zahlenwerte ergeben sich zu $p_2 = 13,92 \text{ MPa}$ und $T_2 = 5,13^\circ\text{C}$ und stimmen damit sehr gut mit den obigen analytischen Zahlenwerten überein. Ein Verlauf von analytischen Größen ist dabei nicht mit auf dem Bild abgebildet; die dickeren, gestrichelten Graphen beschreiben lediglich die Größenverläufe in der Randbedingungs-Zusatzzone, über die die Quelle bzw. Senke auf das Modell aufgebracht worden ist. Die Übereinstimmung mit den Größenverläufen der eigentlichen Modellzone zeigt, dass die geometrischen Einstellungen für die Zusatzzone ideal bestimmt worden sind und der Luftaustausch zwischen diesen beiden Zonen reibungslos und ohne Rückhalte von Fluidmassen abgelaufen ist.

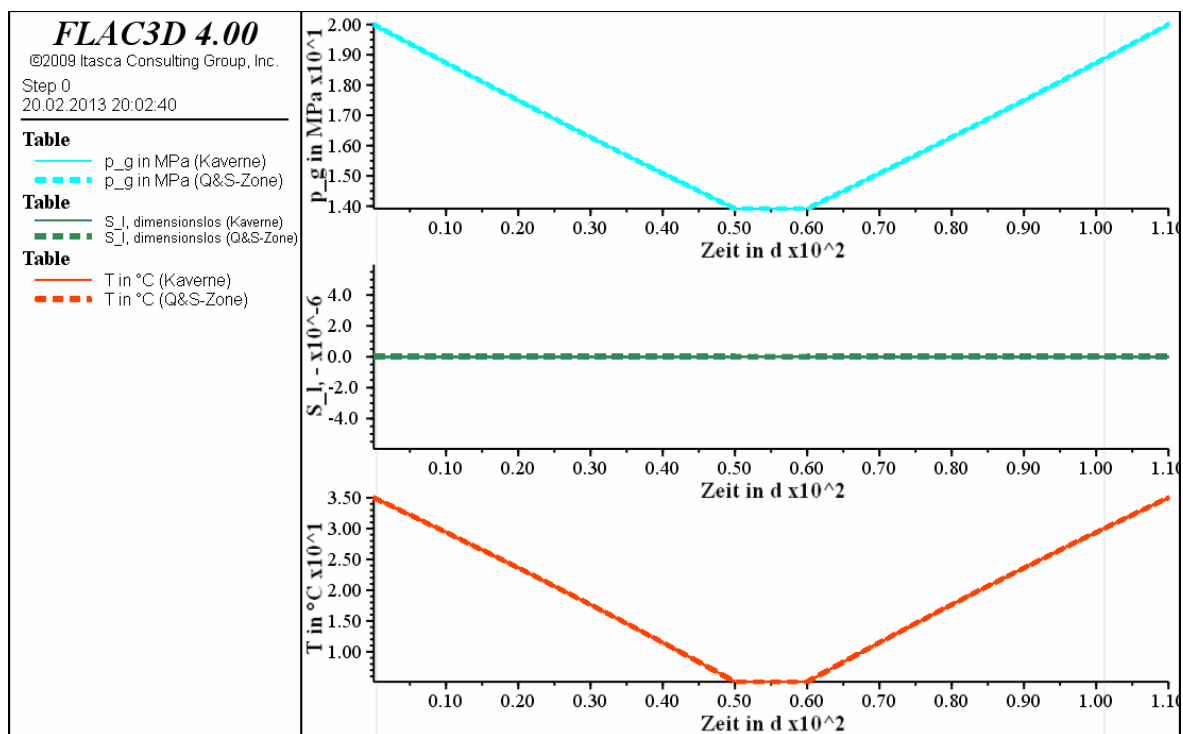


Bild 6.27: Zeitliche Entwicklung von Luftdruck, Sättigungsgrad und Temperatur für einen simulierten Entnahme- und Wiedereinspeisungszyklus einer Druckluftspeicherkaverne

In einer zusätzlichen Berechnungsvariation ist die Temperatur der einzuspeisenden Luft auf einen festen Zahlenwert von $T = 35^\circ\text{C}$ gesetzt worden, und aus dem Berechnungsergebnis in Bild 6.28 kann ersehen werden, dass auf diese Weise aufgrund der erhöhten Wärmeenergiezufuhr erwartungsgemäß sowohl die finale Temperatur wie auch der finale Luftdruck im Hohlraum die anfänglichen Zahlenwerte übersteigen ($p \sim T$ nach Gleichung (6.10)).

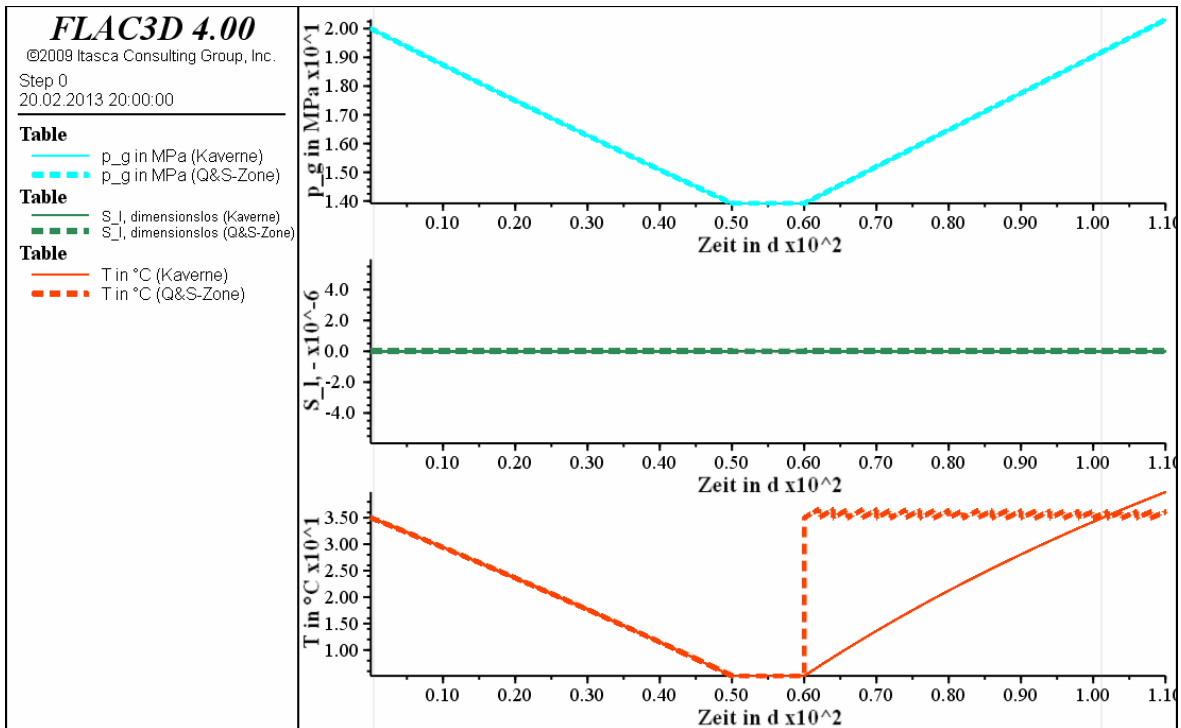


Bild 6.28: Zeitliche Entwicklung von Luftdruck, Sättigungsgrad und Temperatur für einen simulierten Entnahme- und Wiedereinspeisungszyklus einer Druckluftspeicherkaverne – Wiedereinspeisung bei einer fixierten Temperatur von $T=35^\circ\text{C}$

6.3.4 Zweiphasenfluss Wasser/Wasserstoff – EOS-Modul 5

Für eine realitätsnähere Simulation von Gasentstehungsprozessen in untertägigen Endlager-systemen oder -systemkomponenten kann alternativ zum TOUGH2-Modul EOS3 das Modul EOS5 verwendet werden, bei dem die Luftkomponente durch Wasserstoff ersetzt worden ist. Gasbildungsprozesse finden beispielsweise bei der Korrosion der unterschiedlichen Metallsorten aus den Abfallbehältern oder auch bei der mikrobiellen Degradation von organischen Materialien statt. Während der in der Nachbetriebsphase vorhandene Luftsauerstoff schätzungsweise innerhalb eher kurzer Zeit durch die genannten chemischen Abbau- und Umwandlungsprozesse verbraucht werden wird, sammeln sich die Produkte dieser Prozesse,



u.a. Wasserstoff und Methan, im Verlauf der Stilllegungs- und der Nachverschlussphase an und führen auf diese Weise zum Aufbau eines erhöhten Gasdruckes. Überwiegen bei den Edukten die Massen der eingelagerten Metalle stark gegenüber denen der Organika, so ist auch mit einem erhöhten Wasserstoffanteil am entstehenden Gasgemisch zu rechnen. Bei der numerischen Untersuchung der Gasentstehungseffekte im Rahmen der Planung des Schweizerischen Endlagerkonzeptes in *Nagra (2008)* (NTB 08-07) werden z.B. die Entstehungsraten von Wasserstoff und Methan bei eingelagerten Eduktmassen von $3,85 \cdot 10^7 \text{ kg}$ bzw. $2,2 \cdot 10^6 \text{ kg}$ auf insgesamt $2,1 \cdot 10^7 \text{ m}^3$ bzw. $9,2 \cdot 10^5 \text{ m}^3$ im gesamten zeitlichen Verlauf eingeschätzt. In diesem Beispiel nimmt der Wasserstoff also einen Volumenanteil von etwa 96% der gebildeten Gase ein, was die Verwendung des entsprechenden EOS-Moduls 5 von TOUGH2 nahelegt.

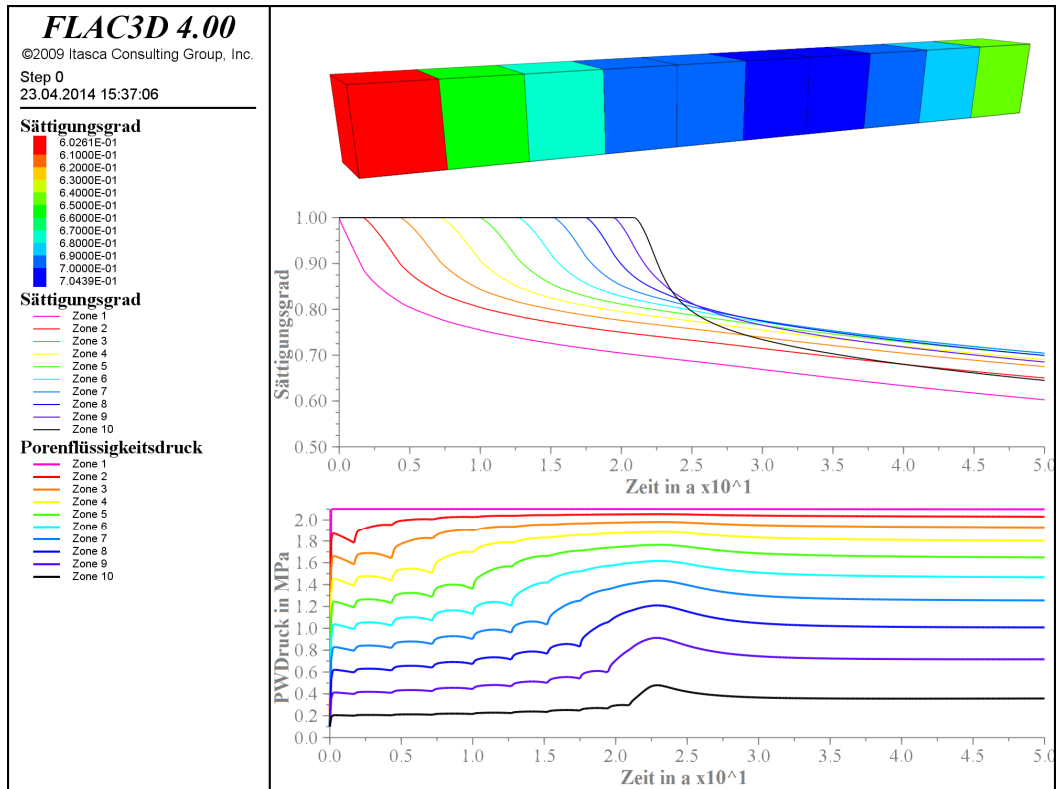
Der Umgang mit TOUGH2-EOS5 ist identisch zu dem mit TOUGH2-EOS3. Lediglich TOUGH2-intern sind für EOS5 herstellerseitig gemäß *Pruess et al. (1999/2012)* andere Kennwerte und andere Beziehungen (\rightarrow *Vargaftik, 1975* und *Dean, 1985*) für Wasserstoff als für Luft implementiert worden. Da diese Kennwerte und Beziehungen von den FTK-Funktionen nicht benötigt werden, konnte sich somit der Einbau von EOS5 in den FTK-Simulator auf die programmiertechnische Überarbeitung der zahlreichen, bereits bestehenden Fallunterscheidungen zwischen EOS9 und EOS3 beschränken.

Aus Bild 6.29 ist der Einfluss der veränderten Kennwerte und Beziehungen für Wasserstoff zu erkennen. Dargestellt ist erneut das Simulationsergebnis der obigen ersten Trocknungs-Berechnungsvariation mit „TOUGH2-EOS3 aus FLAC^{3D}“ aus Bild 6.20 sowie das entsprechende Resultat unter „TOUGH2-EOS5 aus FLAC^{3D}“. Das Wasserstoffgas ist weniger viskos als Luft und strömt daher schneller durch das Modell, welches nunmehr bereits nach 12.350 Jahren vollständig entsättigt ist.

Bei der Aufbringung von Wasserstoff-Quelltermen, die ursprünglich in Volumenraten gegeben sind, ist vom Benutzer aufgrund der im Vergleich zu Luft signifikant verringerten Gasdichte auf die korrekte Angabe der Massenzufuhr rate für den FTK-Simulator zu achten.



(a)



(b)

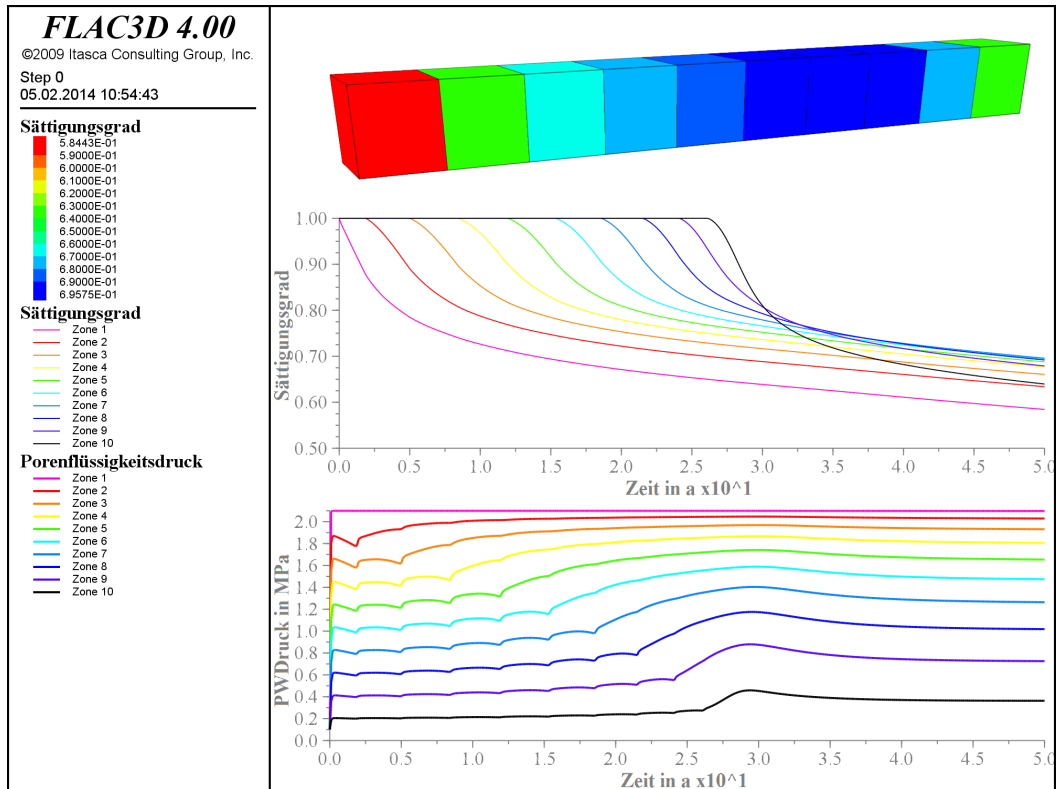


Bild 6.29: Zeitliche Entwicklung von Sättigungsgrad und Porenwasserdruck bei der ersten Trocknungs-Berechnungsvariation ohne Kapillardruck und mit relativer Gaspermeabilität nach Burdine/Corey (a) mit Wasserstoff und (b) mit Luft (Bild 6.20)



6.3.5 Vergleichsberechnungen mit MUFTE-Thermo (Ergebnisse aus *Kühle et al., 1999*) und FLAC

6.3.5.1 Vorbemerkungen

Zur Verifizierung des neu entwickelten FTK-Simulators unter Zweiphasenflussbedingungen werden in einem ersten Schritt nicht gekoppelte, nur durch hydraulische Prozesse charakterisierte Berechnungen zum Vergleich mit den Ergebnissen anderer Simulatoren durchgeführt („TOUGH2 aus FLAC^{3D}“-Funktionalität). Die dazu herangezogenen Berechnungsbeispiele sind einem GRS-Bericht aus dem Jahr 1999, *Kühle et al. (1999)*, entnommen. Analysiert werden unter Annahme eines undurchlässigen Salinargebirges einfache eindimensionale röhrenartige Kammer-Strecken-Systeme. Die Kammern und Strecken sind mit Salzgrus versetzt. Der Porenraum in diesem Salzgrusversatz ist mit Wasser in unterschiedlichem Maß teilgesättigt. Damit liegen fluiddynamisch für den Kammer- und Streckenversatz Zweiphasenflussbedingungen vor. Die numerischen Simulationen wurden im genannten Bericht mit dem Programmsystem MUFTE durchgeführt.

Die Zielstellung dieser Analyse ist damit die Gegenüberstellung und Auswertung der Berechnungsergebnisse zu den Beispielen aus *Kühle et al. (1999)* mit den Simulatoren FTK, MUFTE (Ergebnisse aus *Kühle et al. (1999)*) sowie FLAC (THM-Simulator für zweidimensionale Berechnungsmodelle). Als Simulationsergebnisse sind im Hinblick auf die Verifizierung des FTK-Simulators insbesondere die Sättigungsverteilungen von Wasser und Gas zu bestimmten Zeiten bzw. in vorgegebenen Zeiträumen von Interesse; von weiterem Interesse sind darüber hinaus die Porendrücke von Wasser und Gas sowie die Wasser- und Gasmengenverteilungen und -bewegungen zu einem bestimmten Zeitpunkt bzw. in bestimmten Zeiträumen. Ein weiterer wichtiger Aspekt ist das Erreichen eines stationären Zustands, bei dem sich die Wasser- und die Gassättigung sowie die Porendrücke nicht mehr ändern.

Im Folgenden wird das betrachtete Beispiel entsprechend *Kühle et al. (1999)*, Kapitel 3 mit GRS bezeichnet. Das Beispiel GRS ist ein Kammer-Strecken-System mit einer optionalen konstanten Gasquelle in der Ablagerungskammer. Die Möglichkeiten der Parametervariation im Rahmen dieser Arbeit sind das Vorhandensein/Nichtvorhandensein einer konstanten Gasquelle in der Einlagerungskammer, der Ansatz unterschiedlicher Permeabilitätswerte und die Verwendung unterschiedlicher theoretischer Ansätze für die Kapillardruckfunktionen und die Relativpermeabilitätsfunktionen.



In Kühle *et al.* (1999) ist das Programmpaket MUFTE für die Berechnungen herangezogen worden. Dieses Programmpaket bestand zum Zeitpunkt des Erscheinens des Berichtes in zwei unterschiedlichen Entwicklungsstufen: einer älteren Stufe von MUFTE, mit der die eindimensionalen Berechnungen vorgenommen wurden, und einer neueren Stufe mit der Bezeichnung MUFTE-UG für zweidimensionale Berechnungen, die jedoch bei den hier vorgestellten Beispielen nicht von Bedeutung sind. Die Entwicklungsstufe MUFTE lässt sich wiederum unterteilen in die beiden Versionen MUFTE-Iso für isotherme Berechnungen sowie MUFTE-Thermo, die neben Temperaturvariationen auch das Vorhandensein phasenfremder Komponenten (Wasserdampf bzw. gelöste Luft) berücksichtigt. Die Berechnungen in Kühle *et al.* (1999) sind mit dem Simulator MUFTE-Thermo durchgeführt worden, der im Folgenden im Rahmen des Simulatorenvergleiches nur kurz als MUFTE bezeichnet wird.

In Kühle *et al.* (1999) wurde für das Berechnungsbeispiel GRS gezeigt, dass die Gasquelle erst bei langfristigen Gas- und Wasserströmungen Einfluss auf die Verteilung der Sättigungen im Kammer-Strecken-System hat. Eher kurzfristig treten in der Ablagerungskammer nach Aktivierung der Gasquelle leicht erhöhte Porendrücke in der Gasphase auf. Langfristig ergibt sich bei dem Modell mit Gasquelle in der Kammer eine geringere Wassersättigung.

Bei den vorliegenden Berechnungen werden der Simulator FLAC und der FTK-Simulator eingesetzt. Mit dem FTK-Simulator können grundsätzlich TH²M-gekoppelte Prozesse in einem dreidimensionalen Kontinuum modelliert und simuliert werden. Der Simulator FLAC kann dagegen bei entsprechender Prozessmodellierung nur zweidimensionale räumliche Aufgabenstellungen (in der dritten Dimension unendlich ausgedehnte oder rotationssymmetrische Modellstrukturen) bearbeiten. Die nachfolgende Beschränkung auf die Analyse eindimensionaler Fluidströmungen ist der Tatsache geschuldet, dass hier eine erste Verifikation erfolgt. Im Gegensatz zum Simulator FLAC, Version 7.0, ist in dem Simulator FLAC^{3D}, Version 4.0, noch keine Software-Implementierung für den Zweiphasenfluss existent, Itasca (2009).

Weiter ist bei der Modellierung mit dem Simulator FLAC zu beachten, dass das Programmpaket schwerpunktmäßig auf die Durchführung mechanischer Simulationen ausgerichtet ist. Der Zweiphasenfluss ist eine zusätzliche Funktionalität von FLAC. Grundsätzlich muss jedoch bei Benutzung der Zweiphasenflussfunktionalität in FLAC eine Beschränkung auf eine recht geringe Anzahl von Zonen erfolgen, d.h. eine sehr grobe Diskretisierung vorgenommen werden, da sonst die Berechnungszeit unzumutbar lang wird.

Physikalische und mathematische Grundlagen zum Zweiphasenfluss können aus *Kühle et al. (1999)*, Kapitel 2 und aus dem Handbuch von FLAC, *Itasca (2011)*, sowie in Abschnitt 5 des vorliegenden Berichts entnommen werden.

Die in diesem Abschnitt in die Vergleichsuntersuchungen einbezogenen Simulatoren unterstützen unterschiedliche theoretische Ansätze zur Berechnung der Kapillardrücke und der relativen Permeabilitäten. Die durch die Berechnung aus *Kühle et al. (1999)* vorgegebenen Resultate sind mittels der Ansätze nach (*Burdine/*)*Corey* erhalten worden, welche in den FTK-Simulator nach erfolgter Implementierung des Kapillardruckfunktionsansatzes nach *Brooks/**Corey* in TOUGH2 durch den LfD&G auch übernommen werden konnten. Den Berechnungen mit dem Simulator FLAC muss jedoch in beiden Fällen der Ansatz nach (*Mualem/*)*van Genuchten* zugrunde gelegt werden, da im Code keine weiteren Implementierungen vorhanden sind. Ziel ist also an dieser Stelle, einen Parametersatz für den Ansatz nach (*Mualem/*)*van Genuchten* zu finden, mit dem die vorgegebenen Funktionsverläufe nach (*Burdine/*)*Corey* möglichst gut approximiert werden. Bild 6.30 zeigt exemplarisch die durch die Berechnung aus *Kühle et al. (1999)* vorgegebenen Funktionsverläufe für die Relativpermeabilitäten nach *Burdine/**Corey*, die in Bild 6.31 den Verläufen von entsprechenden approximierenden Funktionen nach *Mualem/**van Genuchten* gegenübergestellt sind. Zu ersehen ist aus Bild 6.31, dass die Relativpermeabilitätsverläufe für die Gasphase (gepunktete Linien) fast identisch sind, während die relativen Permeabilitäten der Flüssigphase nach *Burdine/**Corey* (MUFTE) höhere Zahlenwerte aufzeigen.

6.3.5.2 Modellbeschreibung

Das Berechnungsmodell GRS reflektiert stilisiert die Situation eines gefluteten Endlagers für radioaktive Abfälle, das in diesem Fall nur aus einer Einlagerungskammer und aus einer längeren Strecke besteht. Die Bereiche „Kammer“ und „Strecke“ haben die gleichen Querschnittsabmessungen und grundsätzlichen Materialeigenschaften, unterscheiden sich jedoch hinsichtlich Länge, Wassersättigung, Gassättigung und Wasser- bzw. Porengasdruck. Die Porosität und die Temperatur werden im Bezugsmodell zu jeden Zeitpunkt als konstant angenommen. Mechanische Prozesse werden zur Vereinfachung ausgeblendet.

Das Kammer-Strecken-System wird von einem als undurchlässig angenommenen Gebirge umschlossen. Bild 6.32 zeigt das Berechnungsmodell GRS (Abmessungen in m). Das Be-

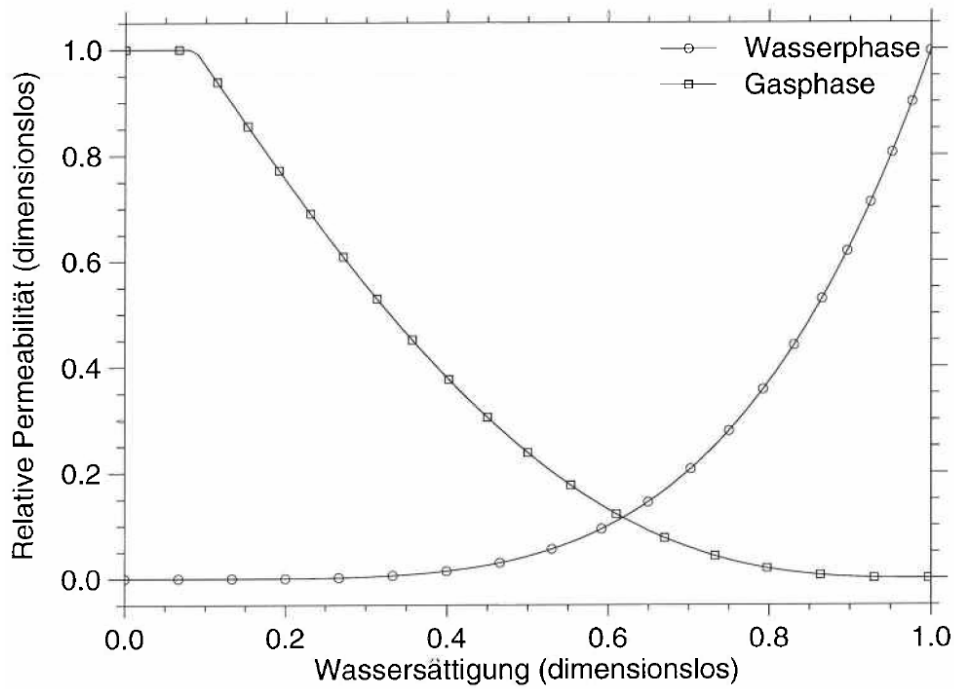


Bild 6.30: Beispiel GRS – Relative Permeabilitäten nach Corey (Berechnungsmodell mit Gasquelle) (Quelle: Kühle et al., 1999, Abbildung 3.3)

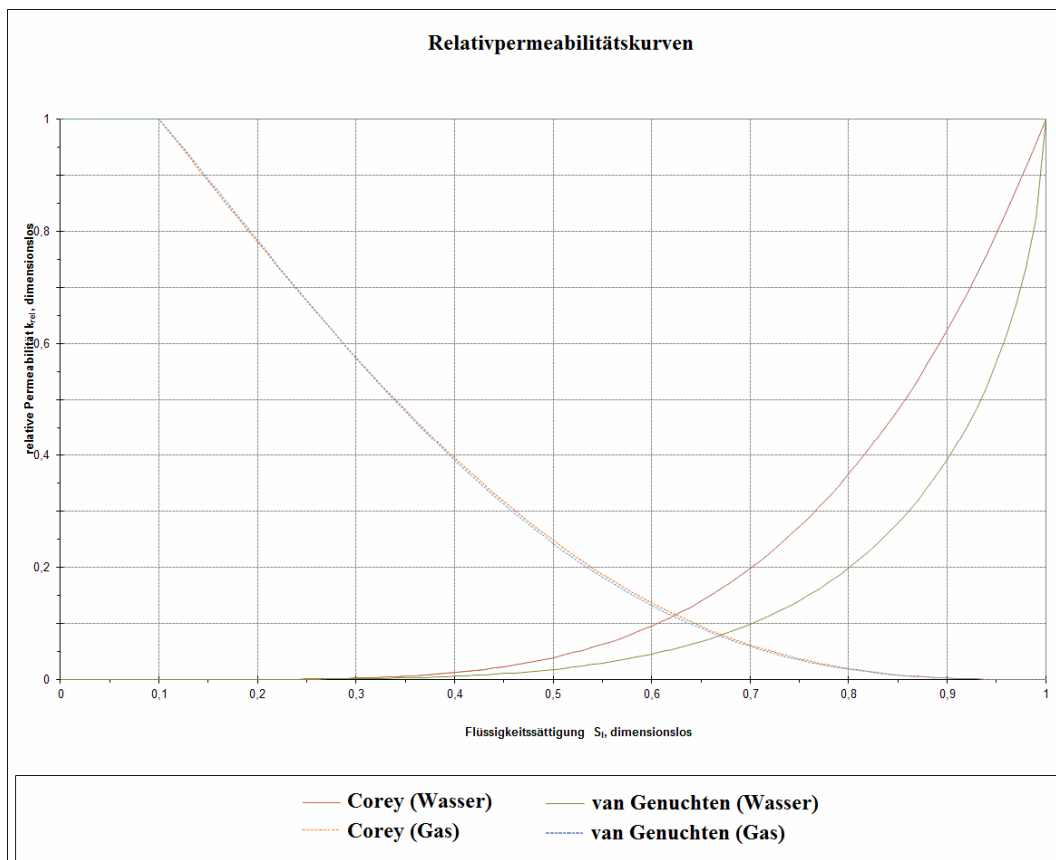


Bild 6.31: Beispiel GRS – Relative Permeabilitäten für Wasser und Gas nach Corey und nach van Genuchten (Berechnungsmodell mit Gasquelle)

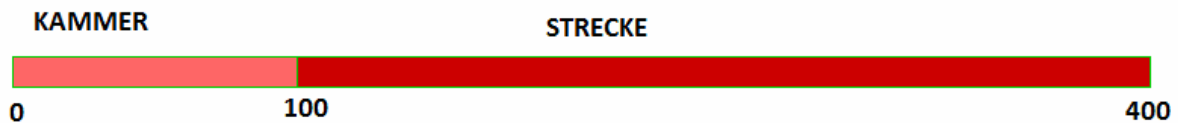


Bild 6.32: Berechnungsmodell GRS (Abmessungen in Metern)

rechnungsmodell GRS hat eine Länge von insgesamt 400 m ; davon entfallen 100 m auf die Kammer und 300 m auf die Strecke. Das Ende der Strecke (rechter äußerer Modellrand in Bild 6.32) ist fiktiv an einen bereits flüssigkeitsgefüllten Schacht angeschlossen. Dort findet der Austausch von Wasser und Gas statt. Als Randbedingung wird dort ein konstanter Gas- und Porenwasserdruck entsprechend der jeweiligen Anfangswerte angenommen.

Die Kammer und die Strecke weisen eine konstante Querschnittsfläche von $A=10,5\text{ m}^2$ auf. Die Permeabilität beträgt nach Vorgabe GRS einheitlich $K = 10^{-11}\text{ m}^2$ entsprechend einer hydraulischen Leitfähigkeit von $k_f = 10^{-4}\text{ m/s}$ – ein in der Praxis verhältnismäßig großer Zahlenwert für ein Versatzmaterial. In der Variation mit Gasquelle werden in der Ablagerungs-

Parameter	Ablagerungs-kammer	Strecke
Länge l	100 m	300 m
Querschnittsfläche A	10,5 m ²	
initiale Wassersättigung S_l	20 %	99 %
initialer Porengasdruck p_g	5 MPa	
initialer Porenwasserdruck p_l	4,9954 MPa	4,9984 MPa
initialer Kapillardruck p_{cap}	0,0046 MPa	0,0016 MPa
Porosität ϕ	25 %	
absolute Permeabilität K	10^{-11} m^2	
Kompressionsmodul des Wassers \check{K}_l	2000 MPa	
Kompressionsmodul des Gases \check{K}_g	5 MPa	
Temperatur T	20 °C	
Erdbeschleunigung g	0 m/s	

Tabelle 6.3: Berechnungsparameter für die Vergleichsuntersuchungen mit dem Berechnungsmodell GRS



kammer im Lauf der Zeit gleichmäßig 40 m^3 Wasserstoff pro Jahr erzeugt. Diese Gasbildungsrate verteilt sich gleichmäßig auf alle Zonen des Kammerbereiches und ist während der gesamten Simulationszeit konstant. Die Temperatur beträgt konstant $T = 20^\circ\text{C}$. Die Porosität ist im gesamten Modell ebenfalls konstant und beträgt $\phi = 0,25$ (25%). Die Berechnungsmodell-Parameter und Anfangsbedingungen können aus der Tabelle 6.3 entnommen werden.

6.3.5.3 Berechnung mit dem FTK-Simulator

(a) Aufbau des Berechnungsmodells

Für das Beispiel GRS sind mit dem FTK-Simulator folgende Variationen simuliert worden:

- Vorhandensein einer Gasquelle in der Ablagerungskammer, die 40 m^3 Wasserstoff pro Jahr produziert (unter Normalbedingungen),
- Nichtvorhandensein einer Gasquelle (d.h. Produktion von 0 m^3 Wasserstoff / Jahr).

Für den Vergleich herangezogen werden die sich zeitbezogen ergebenden Verteilungen der Wassersättigung, der Gassättigung, des Porenwasserdrucks, des Porengasdrucks und des Kapillardrucks. Diese Zustandsgrößen werden zu bestimmten Zeitpunkten dokumentiert, damit ein Vergleich zwischen den Ergebnissen der Simulatoren FTK und FLAC sowie den angegebenen MUFTE-Ergebnissen möglich wird. Bei der Berechnung mit dem FTK-Simulator kann entsprechend der Leistungsfähigkeit dieses Simulators eine feinere Diskretisierung des Berechnungsmodells vorgenommen werden, welche tendenziell einen positiven Einfluss auf die Genauigkeit der Berechnungsergebnisse hat. Da die Ausführungsgeschwindigkeit des FTK-Simulators wesentlich höher ist als die Ausführungsgeschwindigkeit des FLAC-Simulators, fällt der durch die feinere Diskretisierung hervorgerufene höhere Berechnungsaufwand der FTK-Berechnung kaum ins Gewicht.

Weiterhin ist zu beachten, dass hier die wassersättigungsabhängigen Kapillardrücke und die relativen Permeabilitäten über den *Corey*-Ansatz berechnet werden.

Das 400 m lange Modell wird in 400 gleich große Elemente unterteilt. Zur Vereinfachung werden bei der Modellerstellung nur Würfel mit einem Volumen von 1 m^3 verwendet. Dazu wird der vorhandene Querschnitt des Kammer-Strecken-Systems von $A=10,5 \text{ m}^2$ auf



$A=1 \text{ m}^2$ reduziert. Bei der Berechnungsvariation mit Gasquelle in der Ablagerungskammer wird die Quellstärke entsprechend angepasst: Es werden jährlich rund $3,81 \text{ m}^3$ anstatt 40 m^3 Wasser produziert.

Im Programmcode werden vorab im Hinblick auf die nachfolgende Auswertung der Berechnungsergebnisse diskrete Zeitpunkte t_1, t_2, \dots definiert. Nach Einlesen der Anfangsbedingungen und -parameter wird nach Programmstart für den Zeitraum $[0, t_1]$ eine Zweiphasenströmung simuliert. Wenn die Berechnungen abgeschlossen sind, werden zum Zeitpunkt t_1 der Porenwasserdruck, der Porengasdruck, der Kapillardruck, die Wassersättigung und die Gas-sättigung in Form von Tabellen gespeichert. Danach werden sukzessiv die Zustände für die weiteren vorgegebenen Zeitpunkte berechnet. In jedem Zeitpunkt t_i können auch die exakten Wasser- und Gasmengen und damit die Fluidströme berechnet werden. Sie leiten sich aus den Porositäten, den Sättigungsverhältnissen in den verschiedenen Zonen und der jeweiligen Dichte ab.

Nebenbei wird eine History aufgezeichnet. In einer History werden für ein bestimmtes Element im Berechnungsmodell die Zustandsgrößen zu mehreren Zeitpunkten aufgezeichnet, so dass auch die zeitabhängige Entwicklung der Zustandsgrößen für ausgewählte Elemente dokumentiert wird.

(b) Auswertung der Berechnungsergebnisse

In den folgenden Bildern 6.33 bis 6.40 sind für beide Berechnungsvariationen von GRS (mit und ohne aktivierte Gasquelle in der Ablagerungskammer) die Verläufe von Wassersättigung, Porenwasserdruck, Porengasdruck und Kapillardruck für ausgewählte Zeitpunkte abgebildet. In den Bildern 6.33 und 6.34 ist zunächst die allmähliche Aufsättigung der Ablagerungskammer (Anfangswassersättigung $S_i=20\%$) von der Strecke her (Anfangswassersättigung $S_i=99\%$) erkennbar. Wie bereits in Kühle *et al.* (1999) erwähnt, zeigt ein Vergleich beider Bilder keinen nennenswerten Unterschied bei den Sättigungsverläufen, das heißt, dass die Aktivierung der Gasquelle keinen großen Einfluss auf die Sättigungsverläufe hat. Bei der Variation ohne Gasquelle ist im Berechnungsgebiet beispielsweise zu den Zeitpunkten $t=25a$ und $t>70a$ eine leicht bis deutlich erhöhte Wassersättigung im Vergleich zu der Variation mit Gasquelle zu erkennen. Die Aktivierung der Gasquelle in der Ablagerungskammer be-



wirkt nur, dass sich stationäre Sättigungszustände im Vergleich zur Berechnungsvariation ohne Gasquelle später einstellen. Bei Betrachtung des jeweils letzten Zeitpunktes (bei dem Berechnungsmodell mit Gasquelle der Zeitpunkt $t = 10.173a$ und beim Berechnungsmodell ohne Gasquelle der Zeitpunkt $t = 3.764a$) ist der Einfluss der Gasquelle auf den Endsättigungsverlauf erkennbar: ohne Gasquelle stellt sich deutlich früher eine nahezu vollständige Wassersättigung im Kammer-/Streckensystem ein.

Im Lauf der Zeit erfährt der Kammerversatz in beiden Berechnungsvariationen eine Wasser-aufsättigung, die von der Strecke her gespeist wird. In der Nähe zur Strecke erfolgt in der Ablagerungskammer die Aufsättigung erwartungsgemäß deutlich schneller. Im Gegensatz zur Kammer, in der eine Aufsättigung des Porenraums erfolgt, wird die Strecke durch diesen Prozess entsättigt. In Streckenbereichen, die sich in der Nähe der Ablagerungskammer befinden, erfolgt ebenfalls erwartungsgemäß die Entsättigung schneller als in Streckenbereichen, die sich in der Nähe des Schachtübergangs befinden.

In den Bildern 6.35 bis 6.38 werden dann ergänzend die Verläufe des Porenwasser- und des Porengasdrucks aufgezeigt. Bedingt durch das Vorhandensein der Gasquelle ist der durchschnittliche Porengasdruck in der Ablagerungskammer höher als der durchschnittliche Porengasdruck in der Strecke. Ein gegensätzliches Verhalten lässt sich bei dem durchschnittlichen Porenwasserdruck beobachten. In den nachfolgenden Bildern 6.39 und 6.40 sind die Verläufe des Kapillardrucks dargestellt.

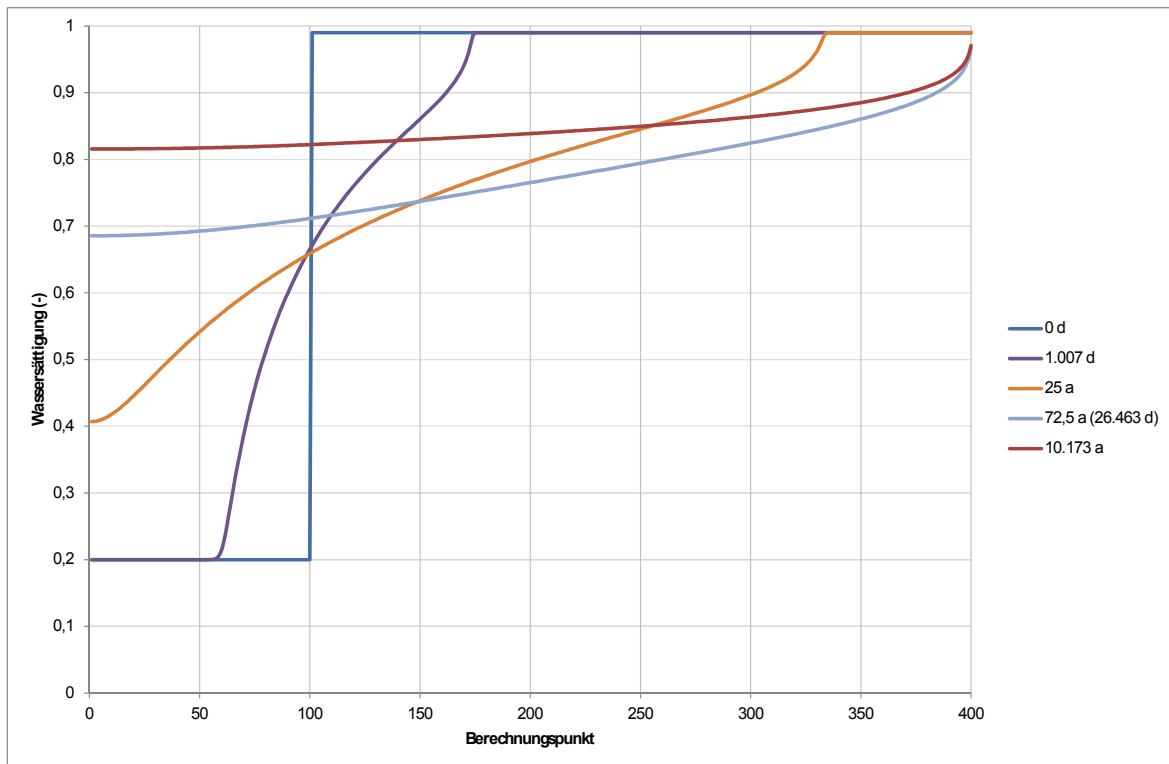


Bild 6.33: Beispiel GRS – Wassersättigung (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / FTK-Simulator

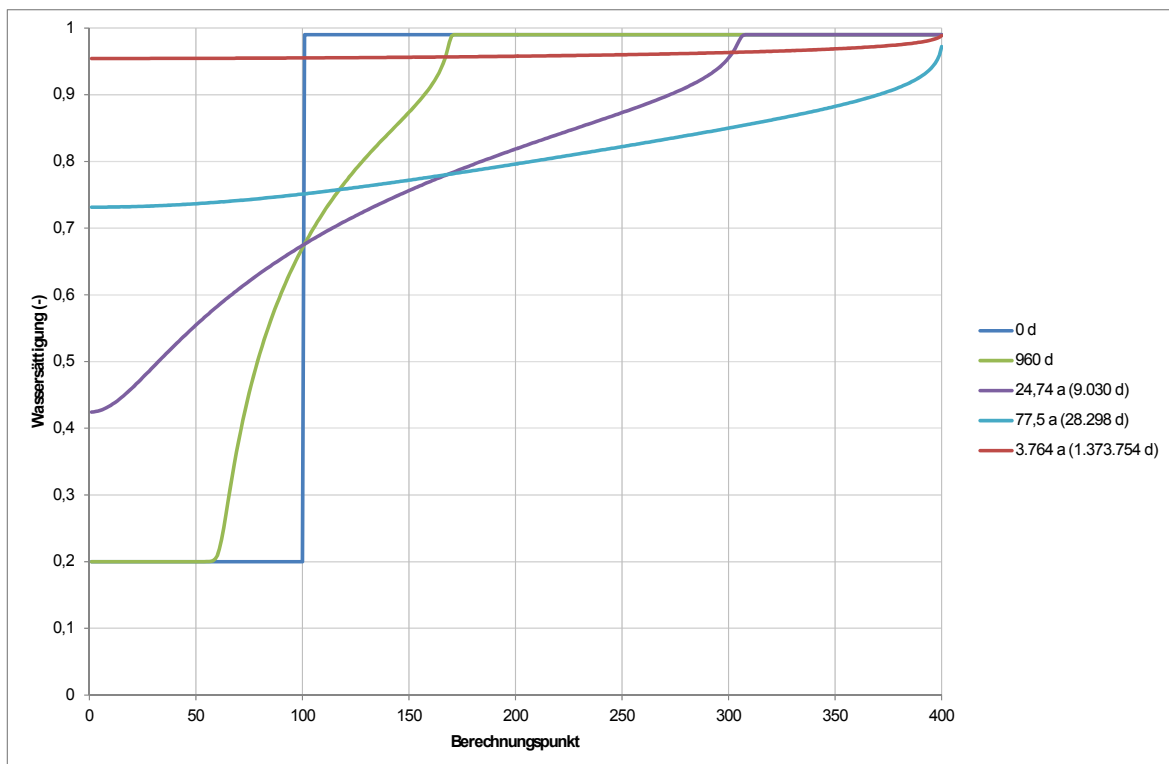


Bild 6.34: Beispiel GRS – Wassersättigung (Berechnungsmodell ohne Gasquelle) / FTK-Simulator

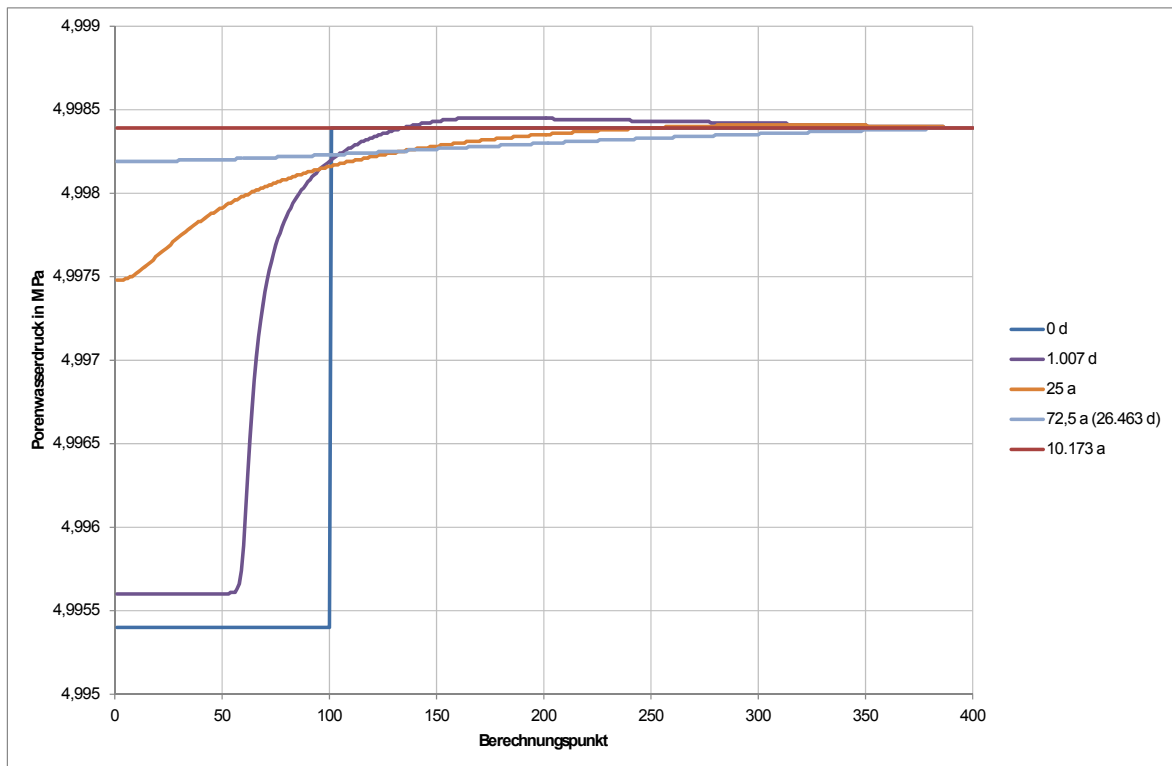


Bild 6.35: Beispiel GRS – Porenwasserdruck (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / FTK-Simulator

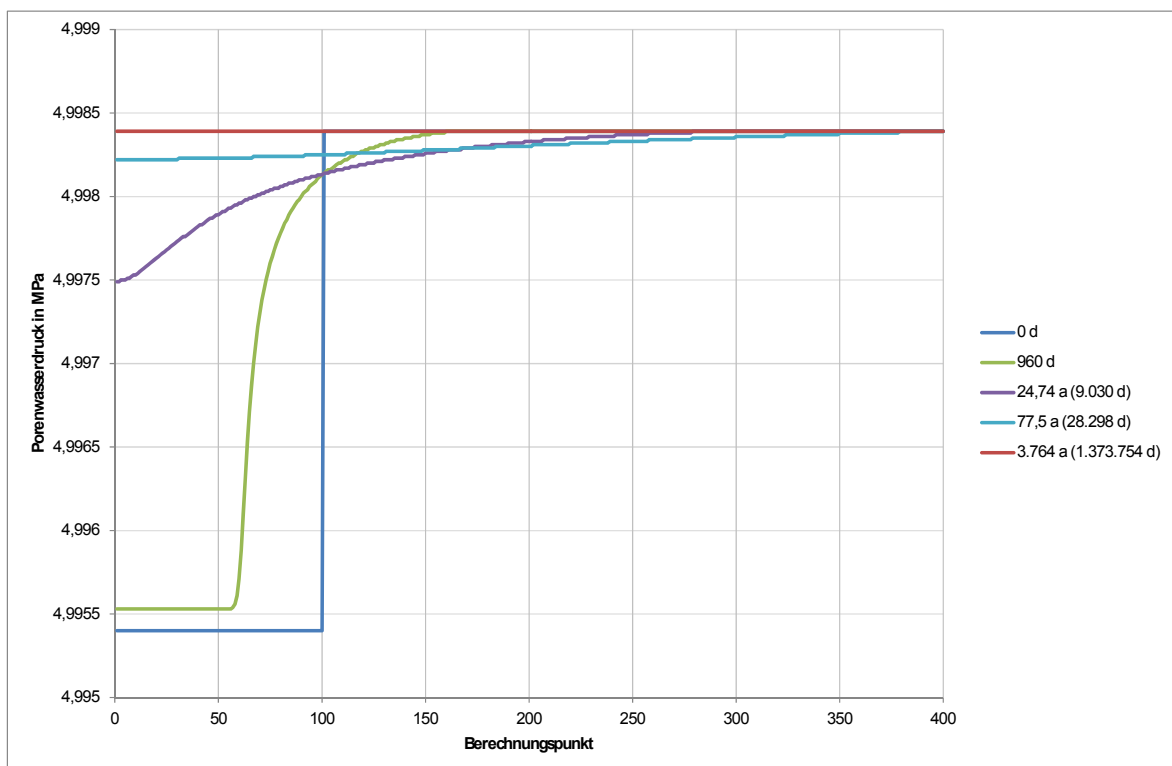


Bild 6.36: Beispiel GRS – Porenwasserdruck (Berechnungsmodell ohne Gasquelle) / FTK-Simulator

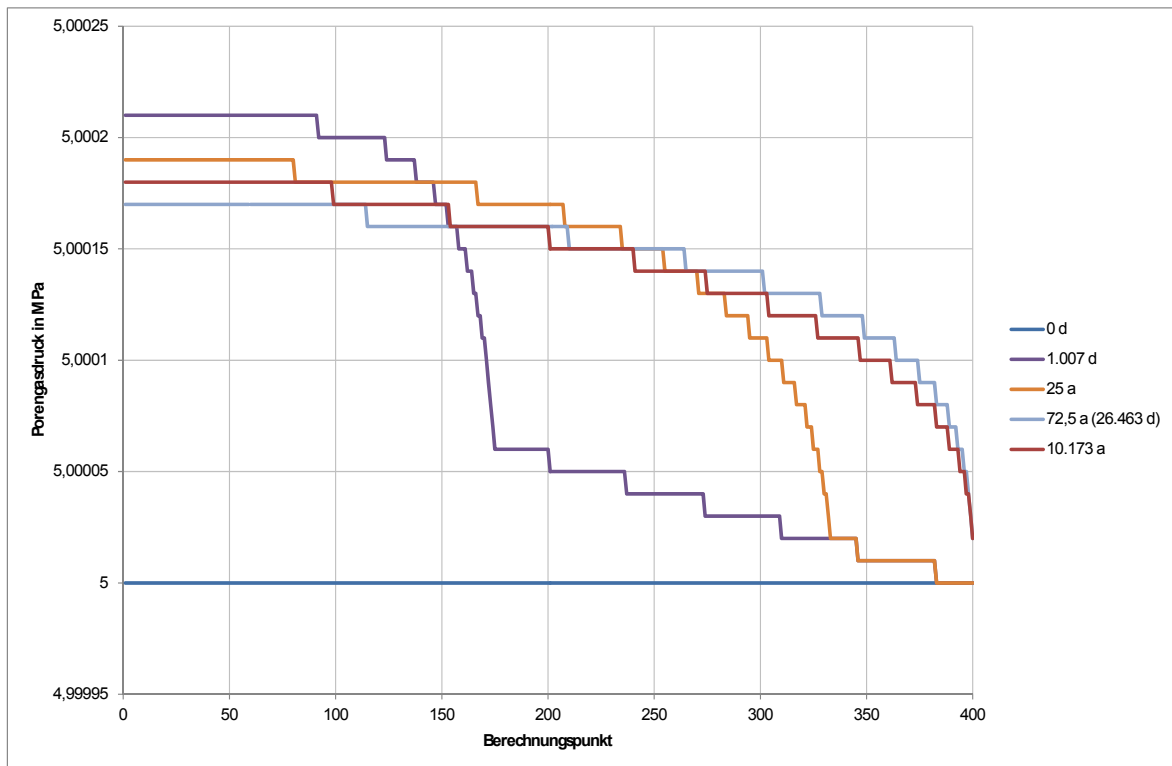


Bild 6.37: Beispiel GRS – Porengasdruck (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / FTK-Simulator

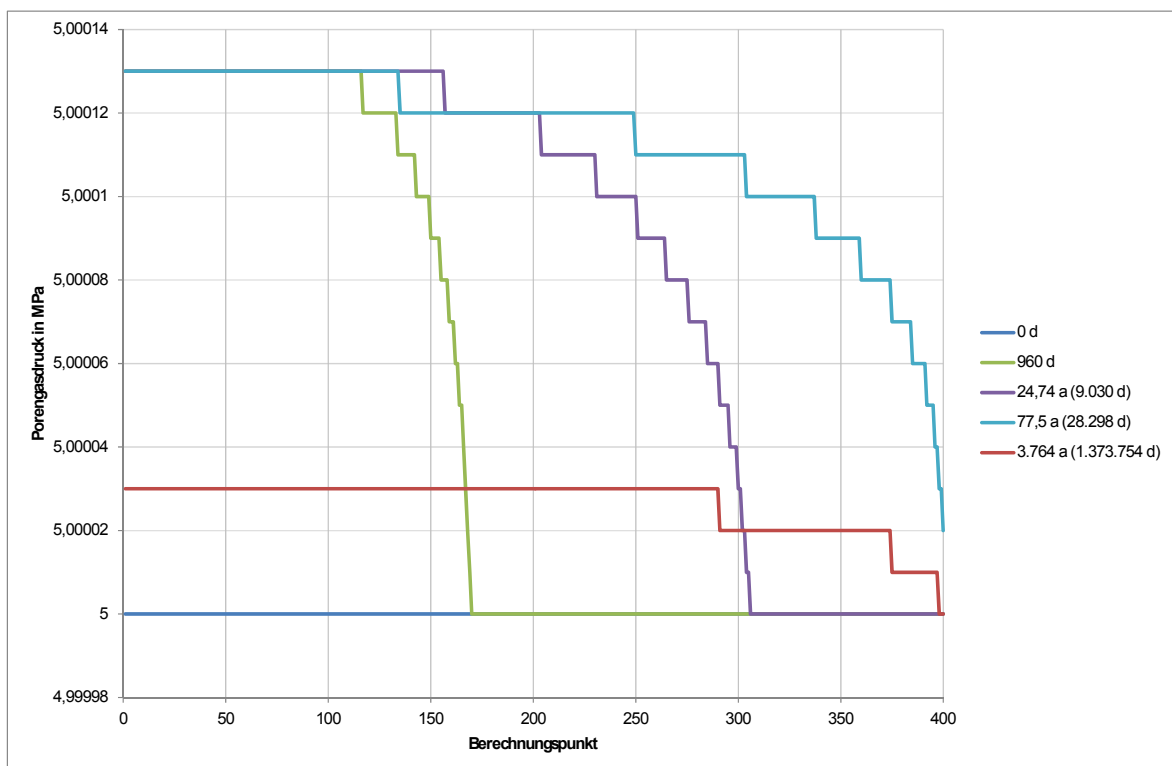


Bild 6.38: Beispiel GRS – Porengasdruck (Berechnungsmodell ohne Gasquelle) / FTK-Simulator

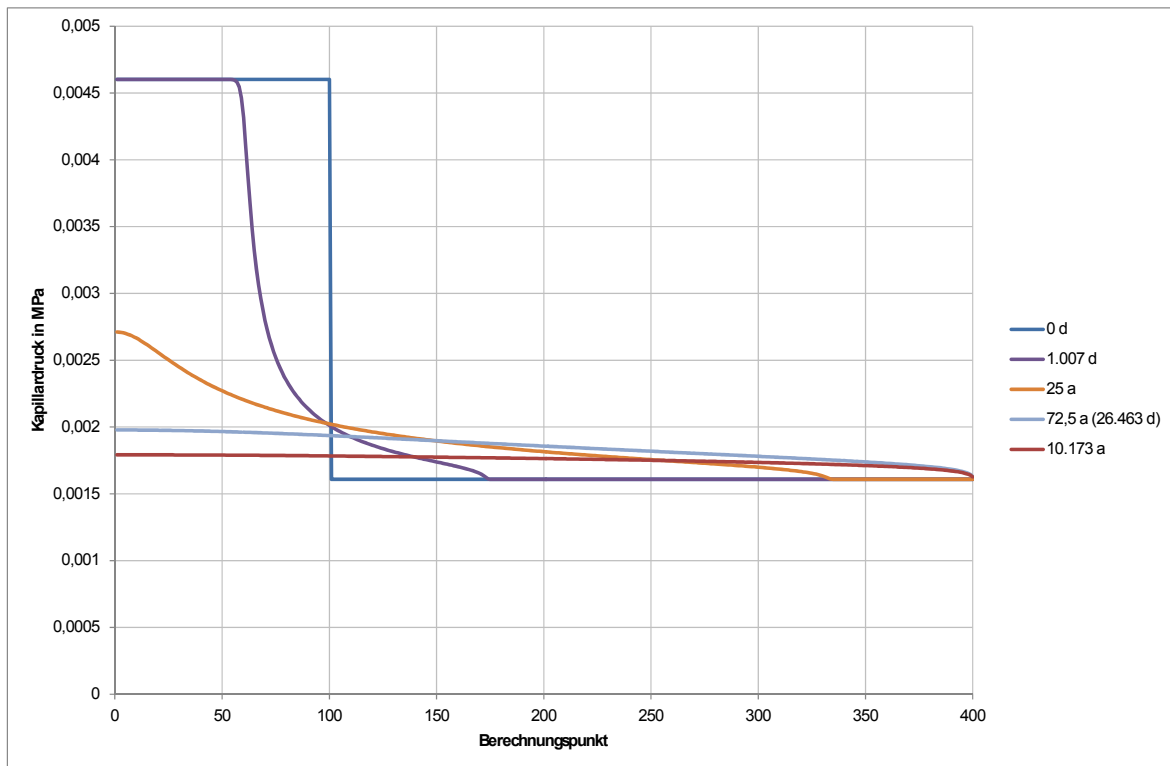


Bild 6.39: Beispiel GRS – Kapillardruck (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / FTK-Simulator

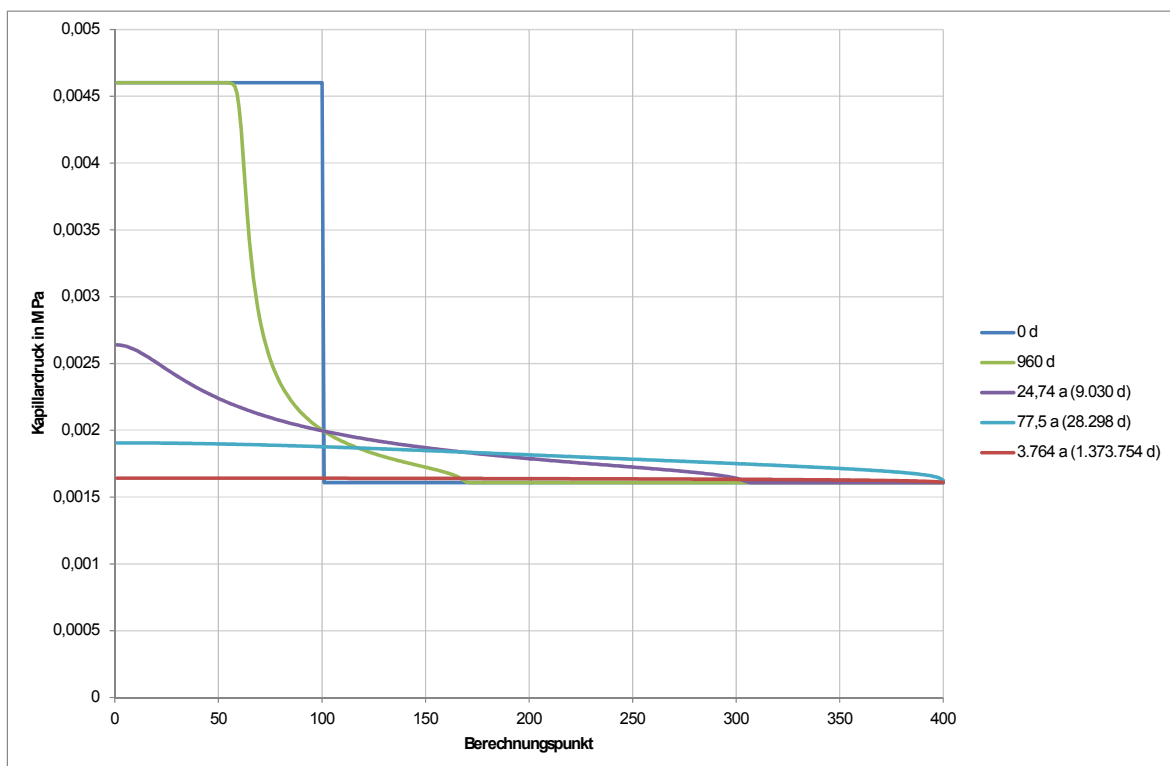


Bild 6.40: Beispiel GRS – Kapillardruck (Berechnungsmodell ohne Gasquelle) / FTK-Simulator



6.3.5.4 Berechnung mit FLAC und Vergleich der Ergebnisse der Simulatoren FTK und FLAC

(a) Aufbau des Berechnungsmodells für den Simulator FLAC

Bei Berechnungen mit dem Simulator FLAC muss eine relativ grobe Diskretisierung des Berechnungsmodells vorgenommen werden, da sonst aufgrund der gewonnenen Erfahrungen die Rechenzeit unverhältnismäßig groß wird. Das 400 m lange Modell wird daher in 40 gleich große Elemente unterteilt. Im Gegensatz zur Modellierung des Berechnungsmodells für den FTK-Simulator wird für die Modellierung des Berechnungsmodells für FLAC wie in Kühle *et al.* (1999) die Modellbreite $d=10,5m$ verwendet, so dass im Hinblick auf die Einheitlichkeit der Querschnittsflächen jedes Element des Berechnungsmodells eine Höhe von $h=10,5m$ aufweist. Weiterhin werden in Längsrichtung nahezu quadratische Elemente angestrebt, damit die hydraulischen FLAC-Berechnungen relativ große Zeitschritte verwenden und somit schneller laufen. Die Länge ergibt sich entsprechend der Diskretisierung zu $l=10m$.

Die Modellierung der relativen Permeabilität und der Kapillardruckfunktion muss im Simulator FLAC über den Ansatz nach *van Genuchten* erfolgen, da keine weiteren physikalischen Ansätze gleichwertig implementiert sind. Daraus folgt ein erster grundsätzlicher Unterschied zwischen der FLAC-Simulation und den MUFTE-/FTK-Simulationen, die in beiden Fällen mit dem *Corey*-Ansatz arbeiten können (in den zum Vergleich herangezogenen MUFTE-Ergebnissen inkludiert).

Wie bei der Erstellung des Berechnungsmodells für den FTK-Simulator werden im Programmcode für FLAC vorab im Hinblick auf die nachfolgende Auswertung der Programmsergebnisse diskrete Zeitpunkte t_1, t_2, \dots definiert. Nach Einlesen der Anfangsbedingungen und -parameter wird nach Programmstart für den Zeitraum $[0, t_1]$ eine Zweiphasenströmung simuliert. Wenn die Berechnungen abgeschlossen sind, werden zum Zeitpunkt t_1 der Porenwasserdruck, der Porengasdruck, der Kapillardruck, die Wassersättigung und die Gassättigung in Form von Tabellen gespeichert. Danach werden sukzessiv die Zustände für die weiteren vorgegebenen Zeitpunkte berechnet. In jedem Zeitpunkt t_i können auch die exakten Wasser- und Gasmengen in allen Zonen des Modells und damit die Fluidströme berechnet werden. Sie leiten sich aus den Porositäten, den Sättigungsverhältnissen in den verschiedenen Zonen und der jeweiligen Dichte ab.

Nebenbei wird eine History aufgezeichnet. In einer History werden für ein bestimmtes Element im Berechnungsmodell die Zustandsgrößen zu mehreren Zeitpunkten aufgezeichnet, so dass auch die zeitabhängige Entwicklung der Zustandsgrößen für ausgewählte Elemente dokumentiert wird.

In Bild 6.41 sind das Berechnungsmodell mit der Ablagerungskammer (rosa) und der Strecke (dunkelrot) sowie die gewählte Diskretisierung in insgesamt vierzig Zonen dargestellt.

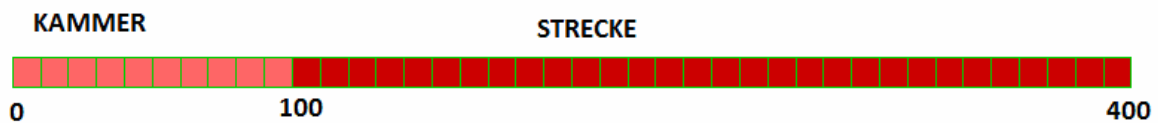


Bild 6.41: Beispiel GRS – Diskretisiertes Berechnungsmodell / FLAC-Simulator

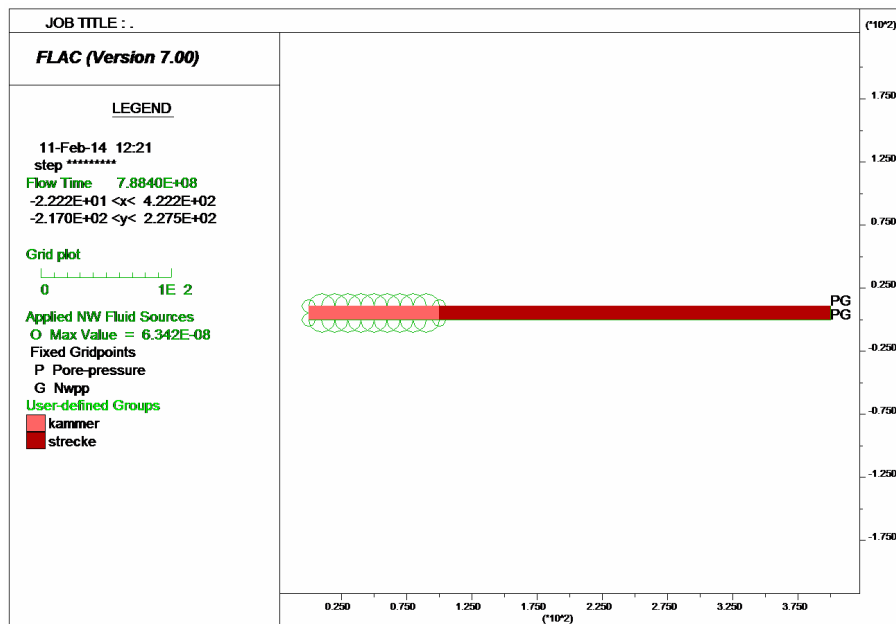


Bild 6.42: Beispiel GRS – Randbedingungen und Gasquelle / Simulator FLAC

In Bild 6.42 werden ergänzend die Randbedingungen bei dem Übergang der Strecke zum Schacht (rechter Rand des Berechnungsmodells) und die Gasquelle in der Ablagerungskammer gezeigt. Die Abkürzung „PG“ am rechten Modellrand bedeutet, dass dort Porenwasserdruck und Porengasdruck während der Berechnungen auf einen konstanten Zahlenwert fixiert sind. Faktisch ist ein Gas- und Wasseraustausch mit dem Schacht möglich; d.h. mit anderen



Worten, dass an der rechten Berechnungsmodell-Seite ein gas- und wasserdurchlässiger Rand vorliegt.

(b) Vergleich der Berechnungsergebnisse der Simulatoren FTK und FLAC

In diesem Abschnitt wird ein grober Vergleich zwischen den verschiedenen Berechnungsmodellen vorgenommen. Da sehr viele Möglichkeiten für einen Datenvergleich bestehen, können nur ausgewählte Berechnungsdaten zu bestimmten Zeitpunkten verglichen werden. Wegen der geringen Simulationsgeschwindigkeit des Simulators FLAC wird exemplarisch der Zeitpunkt $t = 25a$ für den Vergleich mit den Berechnungsergebnissen des FTK-Simulators verwendet.

In den folgenden Bildern 6.43 bis 6.46 werden für die Berechnungsvariation mit aktivierter Gasquelle in der Ablagerungskammer (Referenzmodell) die Verläufe der Wassersättigung und des Kapillardrucks, die die Simulatoren FTK und FLAC liefern, zu den vorgegebenen Zeitpunkten $t = 1.007d$ und $t = 25a$ dargestellt. In den darauf folgenden Bildern 6.47 und 6.48 werden für die Berechnungsvariation ohne aktivierte Gasquelle in der Ablagerungskammer die Verläufe der Wassersättigung und des Kapillardrucks, die die Simulatoren FTK und FLAC liefern, zu dem vorgegebenen Zeitpunkt $t = 960d$ dargestellt.

In jeder verwendeten Berechnungsvariation sind die Verläufe der Wassersättigungskurven des FTK-Simulators höher als die Verläufe der Wassersättigungskurven, die durch den Simulator FLAC berechnet worden sind, Bilder 6.43, 6.45 und 6.47. In den Bildern 6.44, 6.46 und 6.48 werden die Verläufe des Kapillardrucks für die erwähnten Berechnungsvariationen aufgetragen. Hierbei ist erkennbar, dass zu einem festen Zeitpunkt der Kapillardruck im Berechnungsmodell des FTK-Simulators in jeder Zone größer ist als der Kapillardruck im Berechnungsmodell des Simulators FLAC. Dieser Unterschied bei den Verlaufskurven des Kapillardrucks ist in dem Übergangsbereich zwischen Ablagerungskammer und Strecke relativ gering.

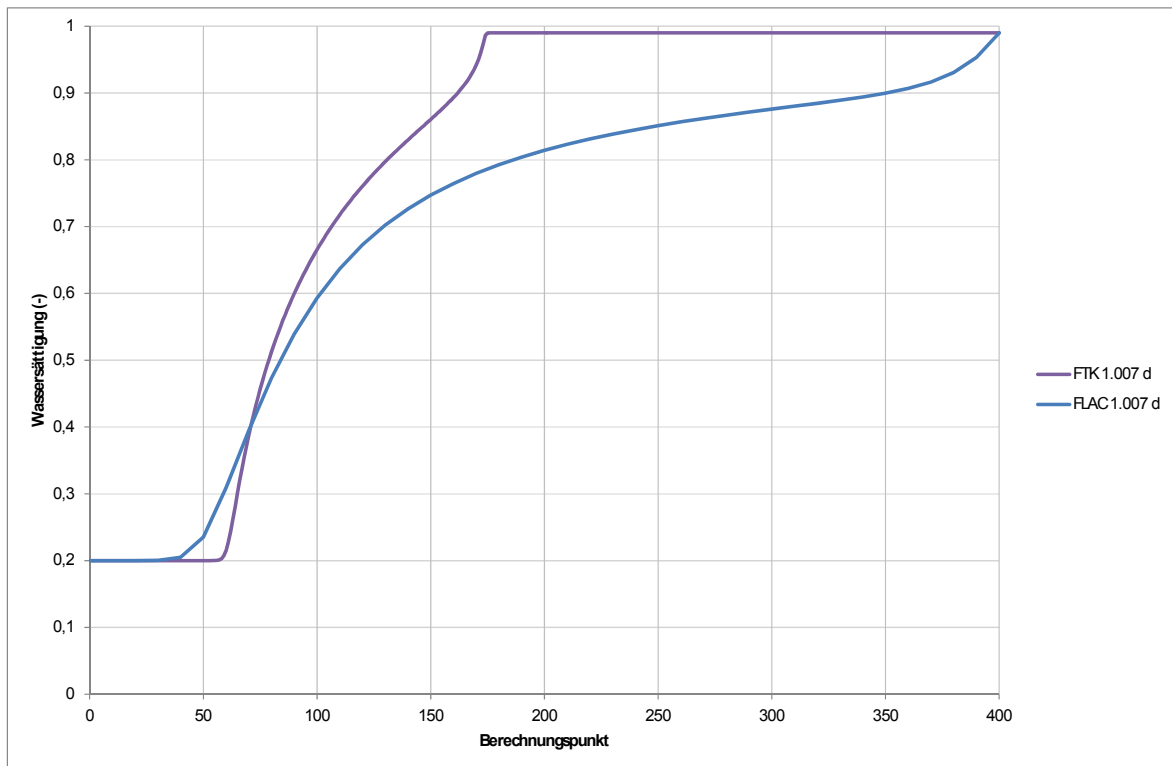


Bild 6.43: Beispiel GRS – Vergleich der Wassersättigung zum Zeitpunkt $t = 1.007 d$ (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / Simulatoren FTK und FLAC

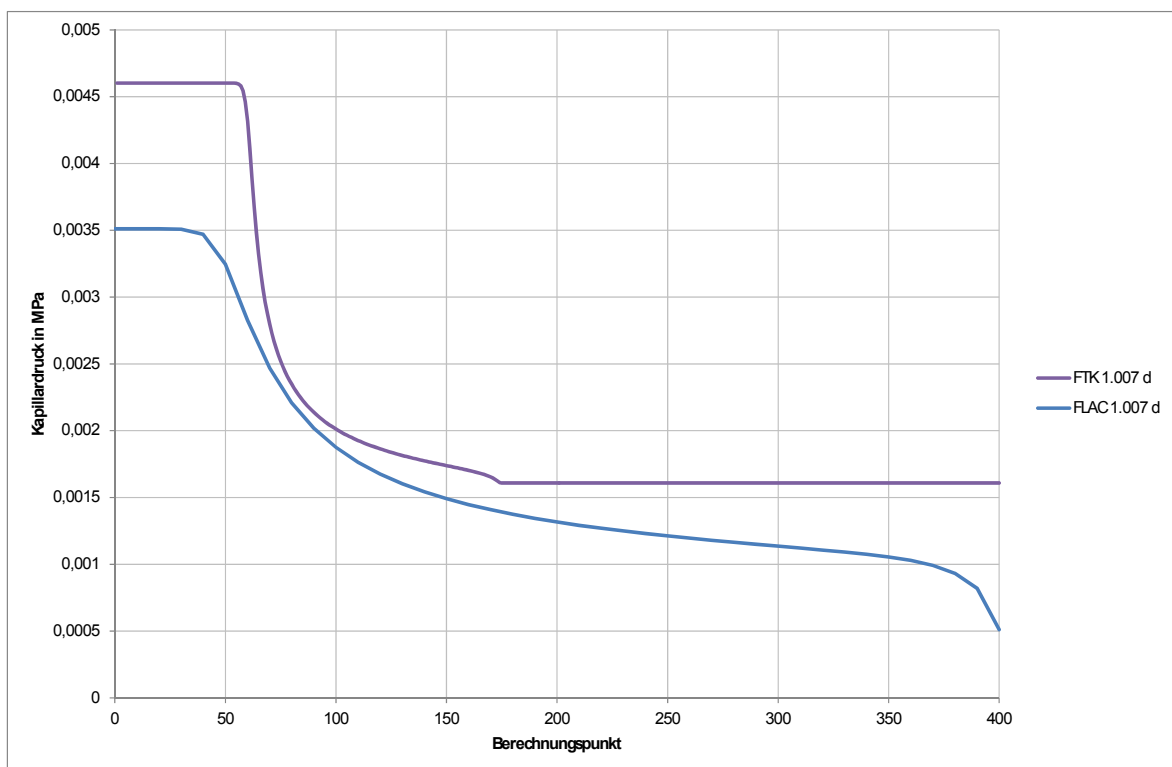


Bild 6.44: Beispiel GRS – Vergleich des Kapillardrucks zum Zeitpunkt $t = 1.007 d$ (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / Simulatoren FTK und FLAC

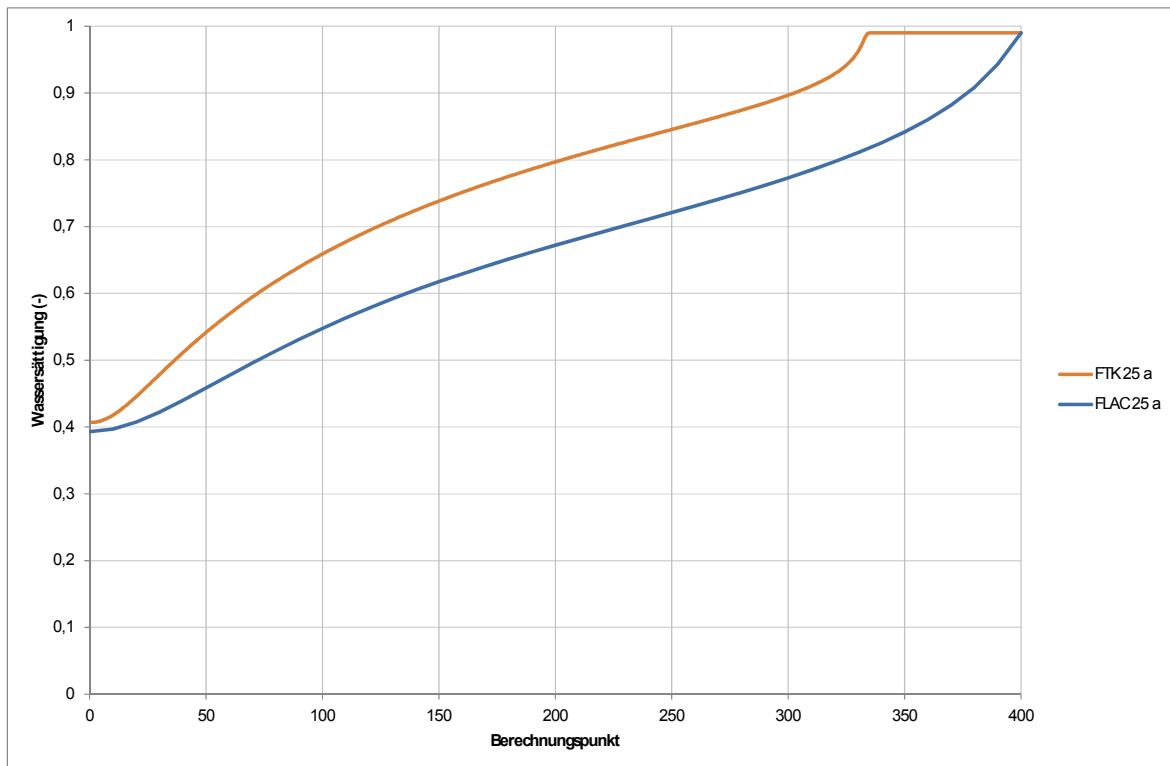


Bild 6.45: Beispiel GRS – Vergleich der Wassersättigung zum Zeitpunkt $t = 25a$ (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / Simulatoren FTK und FLAC

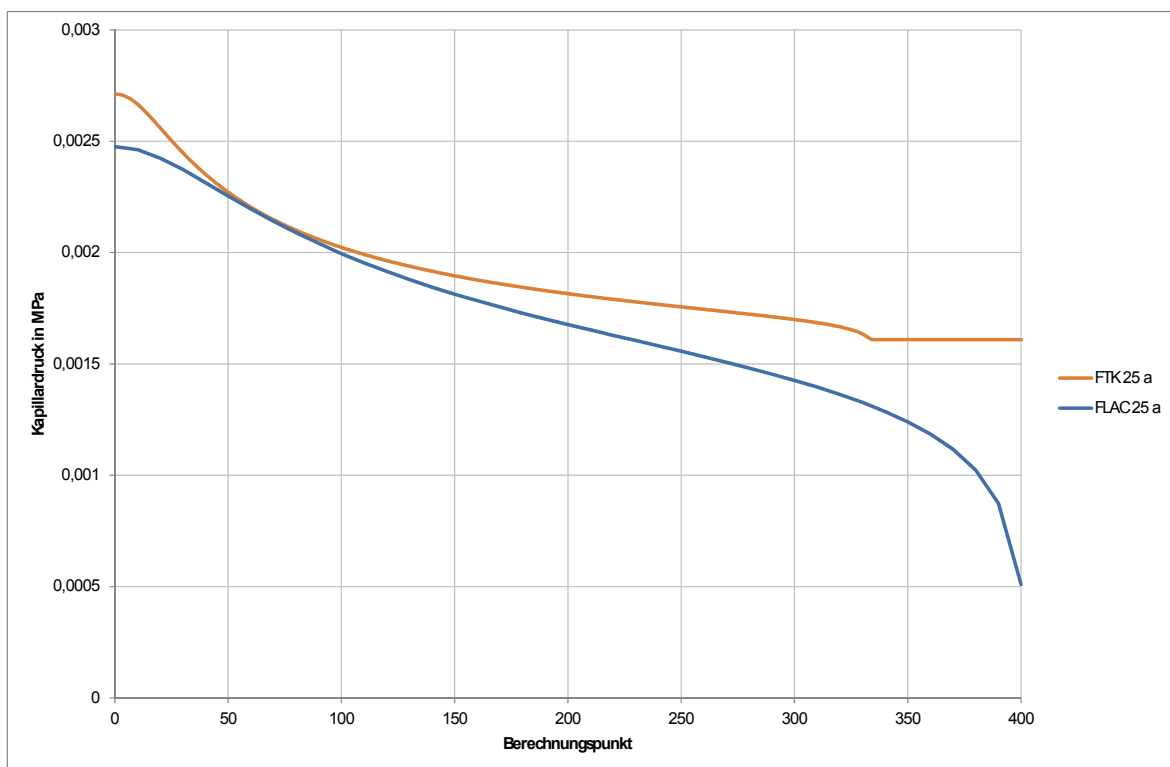


Bild 6.46: Beispiel GRS – Vergleich des Kapillardrucks zum Zeitpunkt $t = 25a$ (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / Simulatoren FTK und FLAC

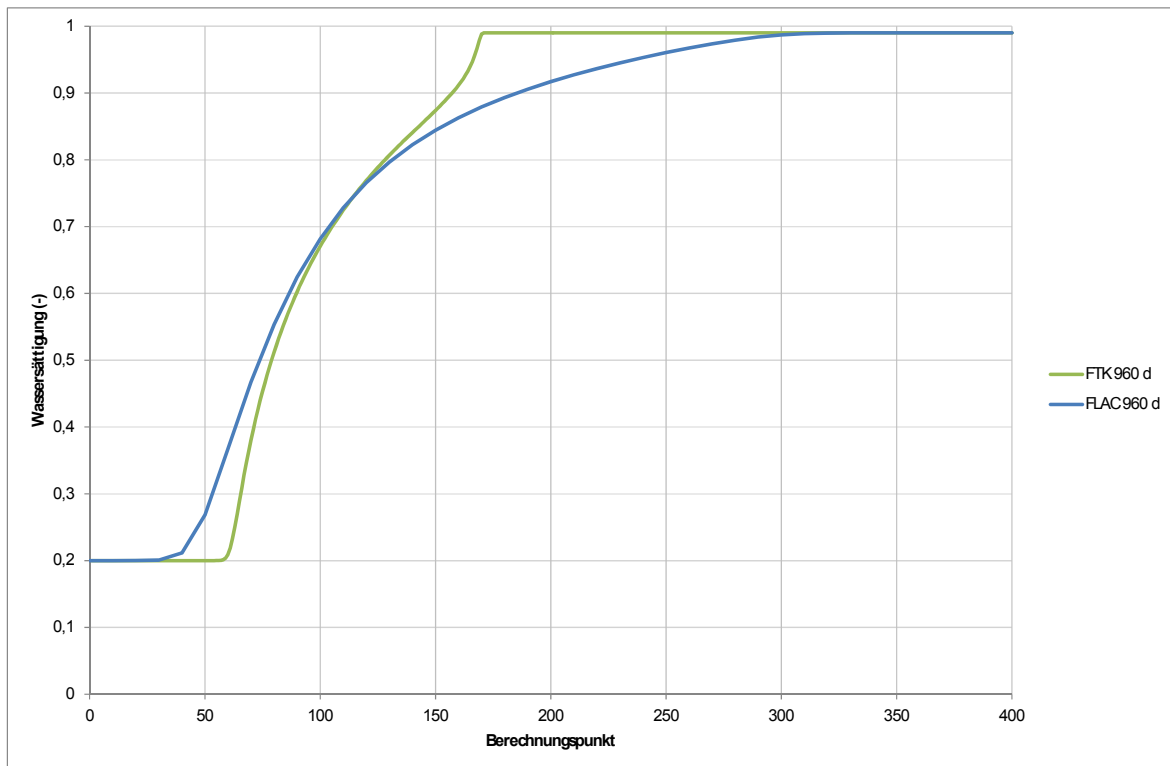


Bild 6.47: Beispiel GRS – Vergleich der Wassersättigung zum Zeitpunkt $t = 960 d$ (Berechnungsmodell ohne Gasquelle) / Simulatoren FTK und FLAC

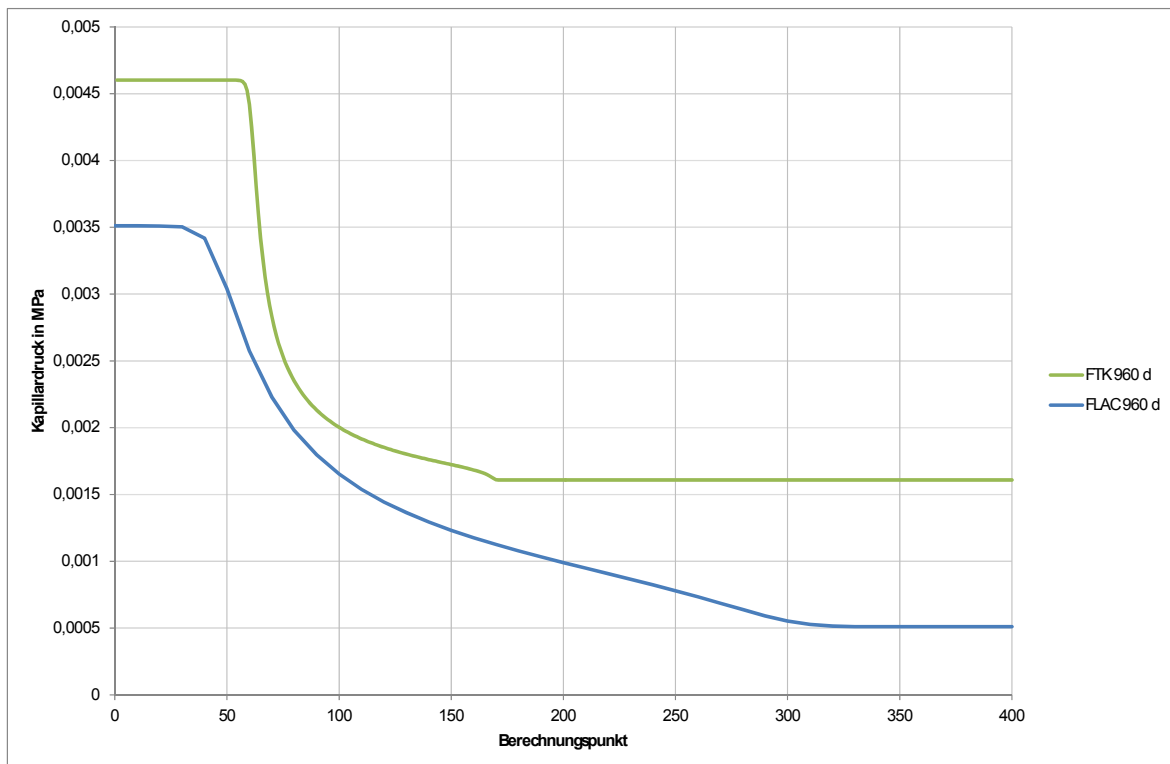


Bild 6.48: Beispiel GRS – Vergleich des Kapillardrucks zum Zeitpunkt $t = 960 d$ (Berechnungsmodell ohne Gasquelle) / Simulatoren FTK und FLAC

6.3.5.5 Vergleich der Ergebnisse der Simulatoren FTK und MUFTE-Thermo

In diesem Abschnitt erfolgt eine Gegenüberstellung der Ergebnisse des FTK-Simulators mit den in *Kühle et al. (1999)* vorgestellten Berechnungsergebnissen des MUFTE-Simulators. Für den Vergleich herangezogen werden die sich zeitbezogenen ergebenden Verteilungen der Wassersättigung, der Gassättigung, des Porenwasserdrucks, des Porengasdrucks und des Kapillardrucks. Diese Zustandsgrößen werden zu bestimmten Zeitpunkten dokumentiert, damit ein Vergleich zwischen den Ergebnissen des FTK-Simulators mit den angegebenen MUFTE-Ergebnissen möglich wird.

In den nachstehenden Bildern erfolgt eine visuelle Gegenüberstellung der Ergebnisse des FTK-Simulators und der Ergebnisse des MUFTE-Simulators für ausgewählte Zeitpunkte. Die Bilder mit den Berechnungsergebnissen der MUFTE-Simulation sind aus *Kühle et al. (1999)* entnommen.

Die Bilder 6.49 und 6.50 bilden die Verläufe der Wassersättigung für das Referenzmodell ab. Aus den Verläufen der Wassersättigung für die beiden letzten Zeitpunkte $t = 25a$ und $t = 72,5a$ sind nahezu identische Berechnungsergebnisse der Simulatoren FTK und MUFTE erkennbar. Die Sättigungsverläufe des FTK-Simulators liegen hierbei leicht oberhalb der Sättigungsverläufe des MUFTE-Simulators. Zum Zeitpunkt $t = 25a$ wird bei dem MUFTE-Simulator in den rechten Streckenbereichen eine höhere Wassersättigung erhalten, das heißt, dass sich die Wassersättigungsverläufe beider Simulatoren in diesen Bereichen schneiden.

Aus den Bildern 6.51 bis 6.54 sind die Verläufe des Porenwasserdrucks und des Porengasdrucks für das Referenzmodell abgebildet, aus denen sich auch nahezu identische Verläufe der Berechnungsergebnisse beider Simulatoren entnehmen lassen. Die stationären Zustände der Druckverläufe der Gas- und Wasserphase, die bei dem Referenzmodell mit den Verläufen zum Zeitpunkt $t = 10.173a$ assoziiert werden können, sind bei beiden Simulatoren identisch.

In den Bildern 6.55 und 6.56 sind die Verläufe der Wassersättigung für das Berechnungsmodell ohne Gasquelle in der Ablagerungskammer abgebildet. Auch hier ist erkennbar, dass der FTK-Simulator im Vergleich zum MUFTE-Simulator nahezu identische Verläufe generiert. In den Bildern 6.57 und 6.58 werden die Verläufe des Porengasdrucks gegenübergestellt. Hierbei liegen die Ergebnisse des MUFTE-Simulators oberhalb den Berechnungsergebnissen des FTK-Simulators.

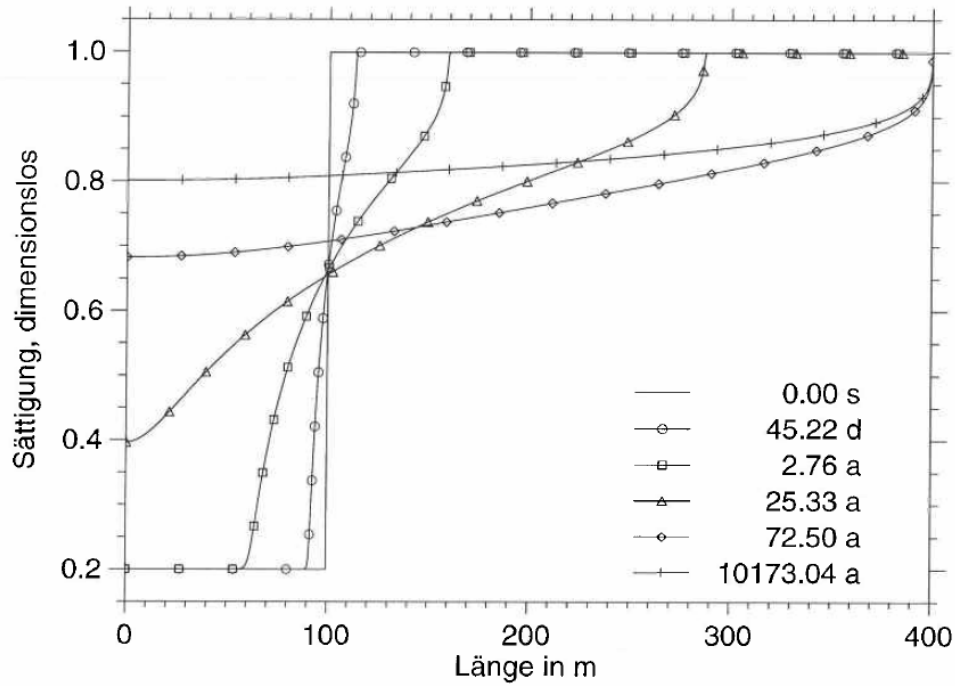


Bild 6.49: Beispiel GRS – Wassersättigung (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / Simulator MUFTE (Quelle: Kühle et al., 1999, Abb. 3.5)

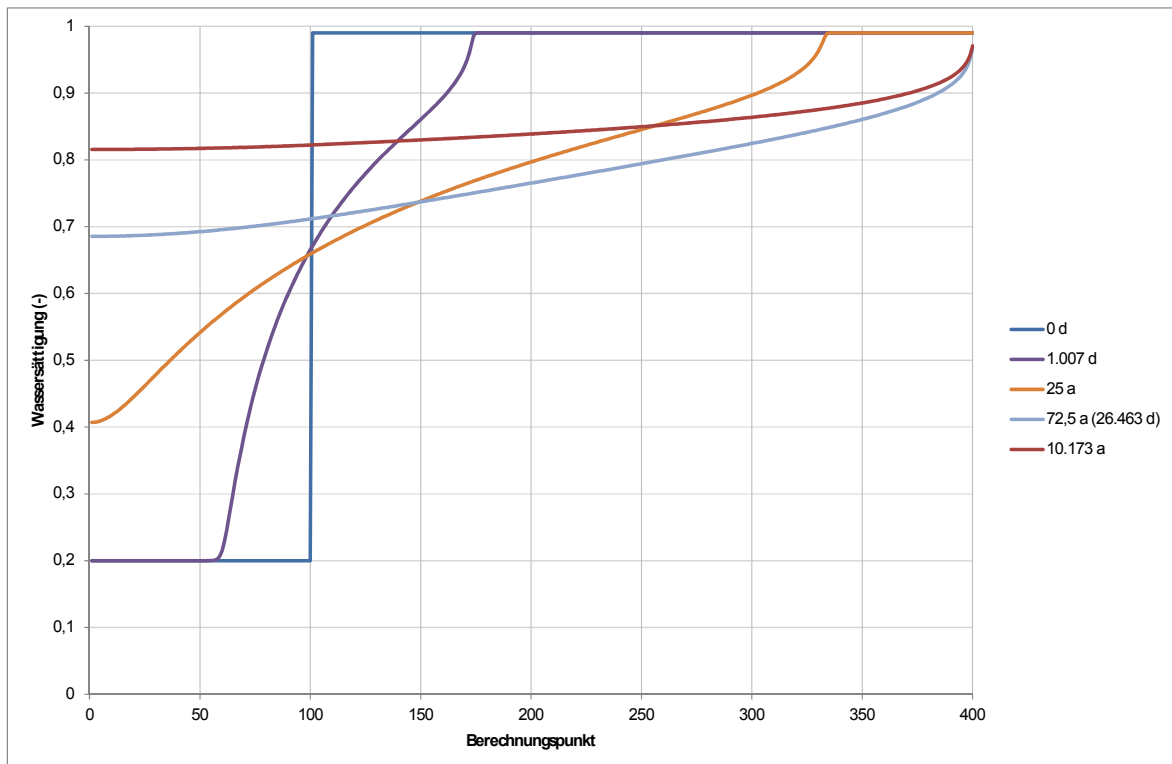


Bild 6.50: Beispiel GRS – Wassersättigung (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / FTK-Simulator

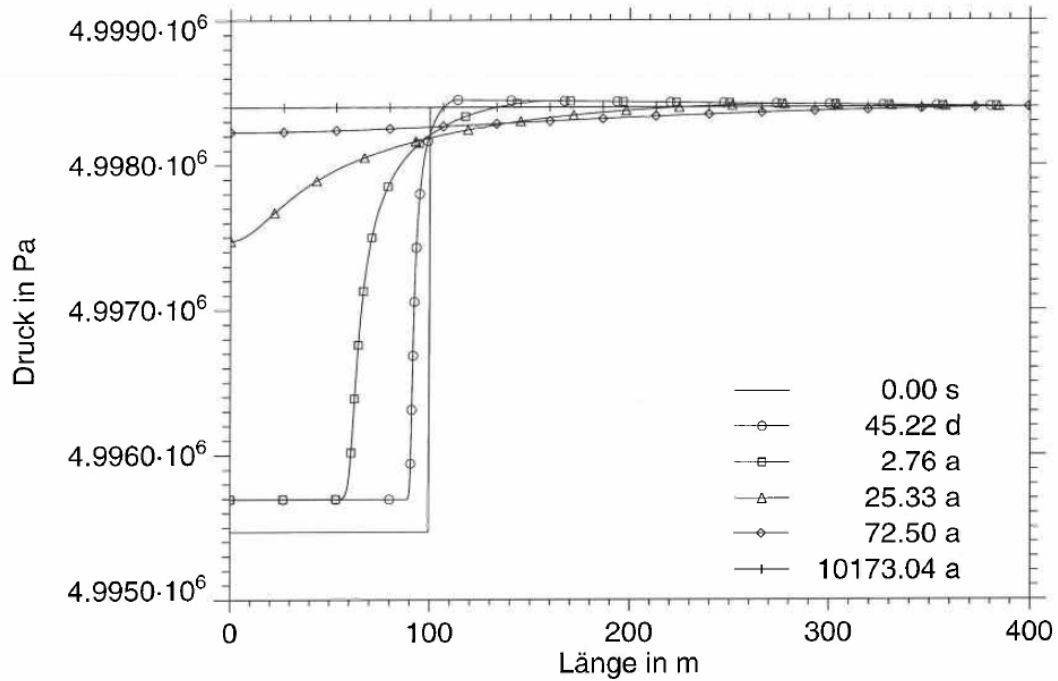


Bild 6.51: Beispiel GRS – Porenwasserdruck (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / Simulator MUFTE (Quelle: Kühle et al., 1999, Abb. 3.7)

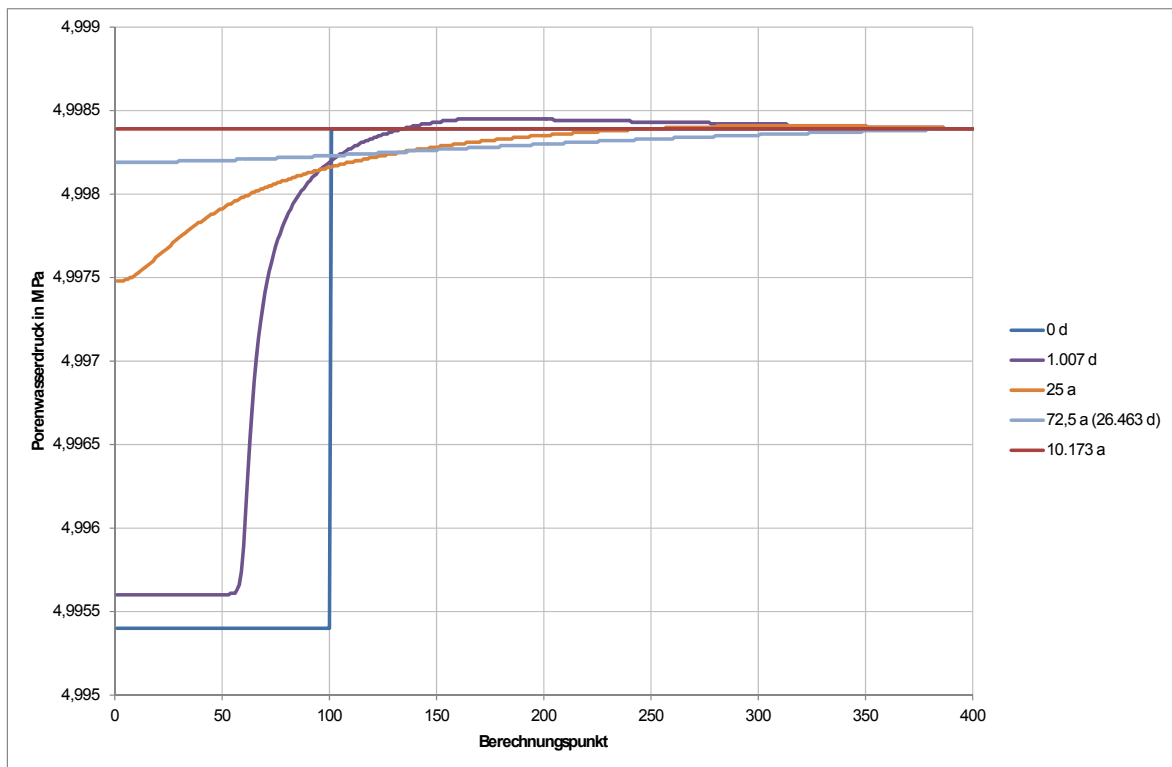


Bild 6.52: Beispiel GRS – Porenwasserdruck (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / FTK-Simulator

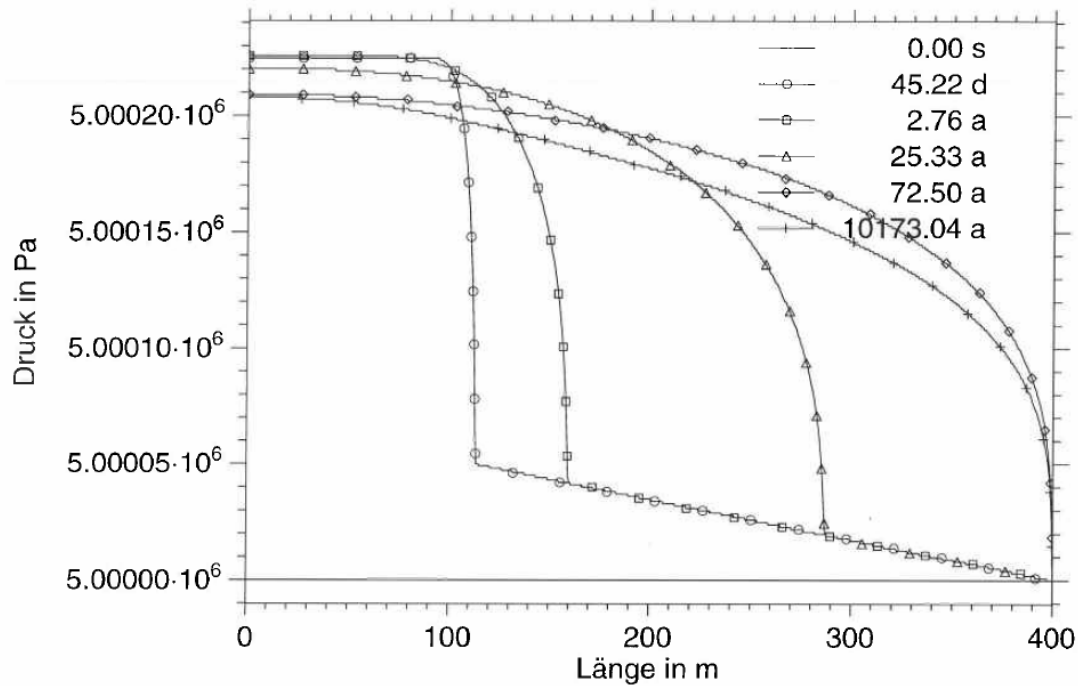


Bild 6.53: Beispiel GRS – Porengasdruck (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / Simulator MUFTE (Quelle: Kühle et al., 1999, Abb. 3.9)

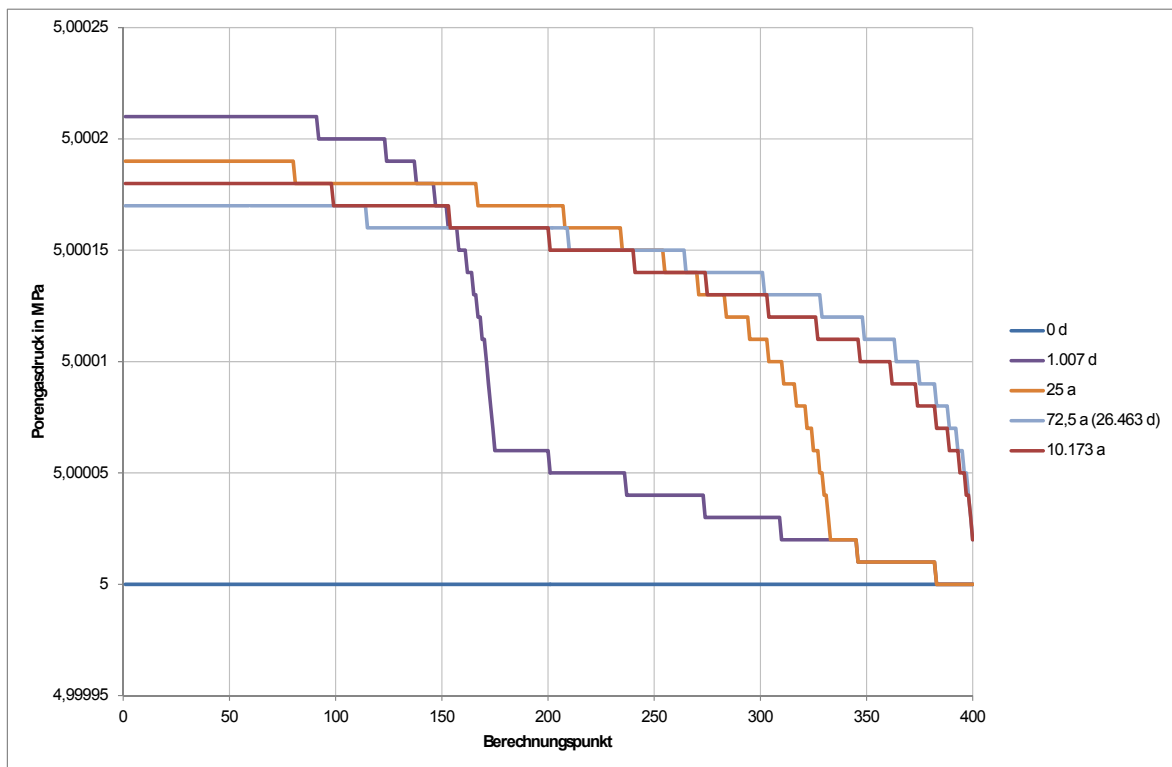


Bild 6.54: Beispiel GRS – Porengasdruck (Berechnungsmodell mit Gasquelle) / FTK-Simulator

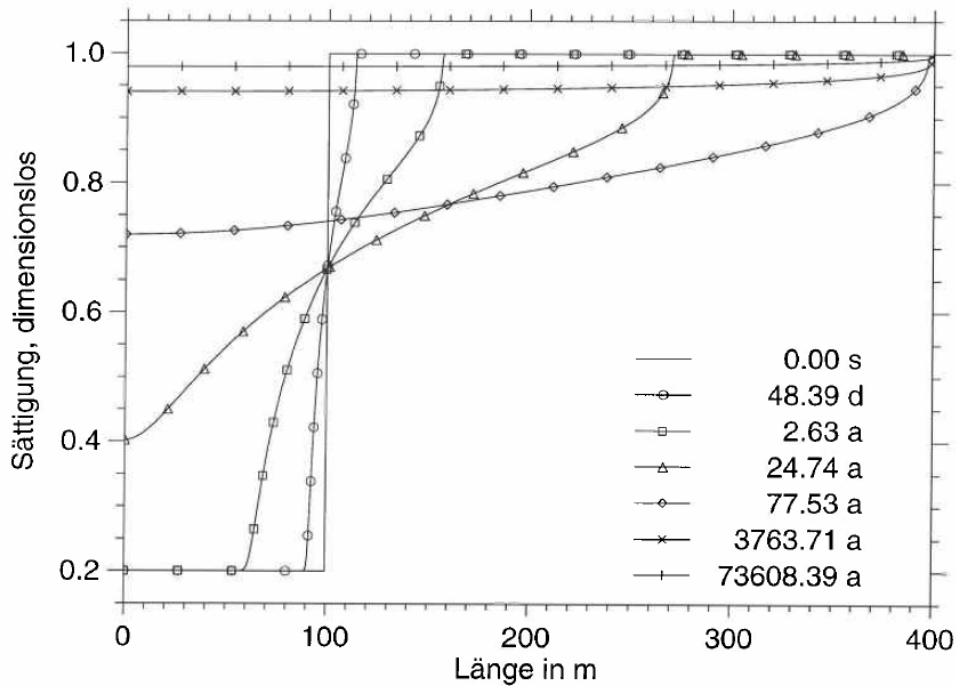


Bild 6.55: Beispiel GRS – Wassersättigung (Berechnungsmodell ohne Gasquelle) / Simulator MUFTE (Quelle: Kühle et al. (1999), Abb. 3.6)

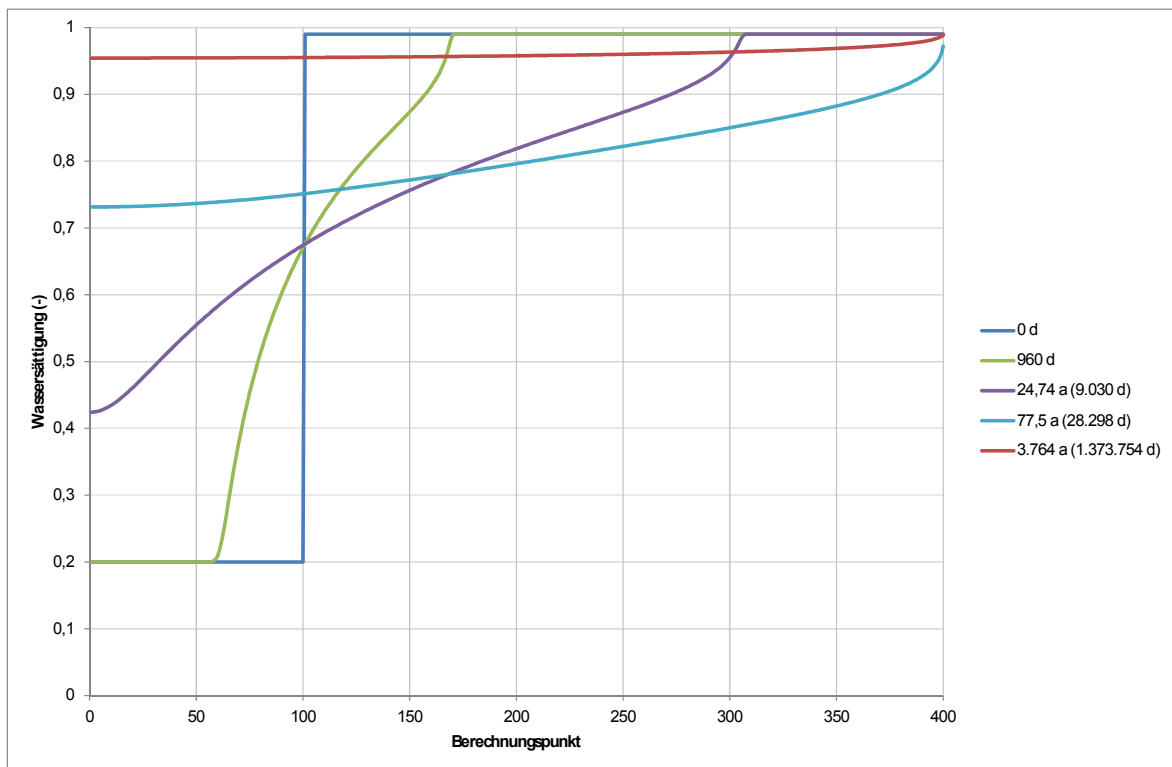


Bild 6.56: Beispiel GRS – Wassersättigung (Berechnungsmodell ohne Gasquelle) / FTK-Simulator

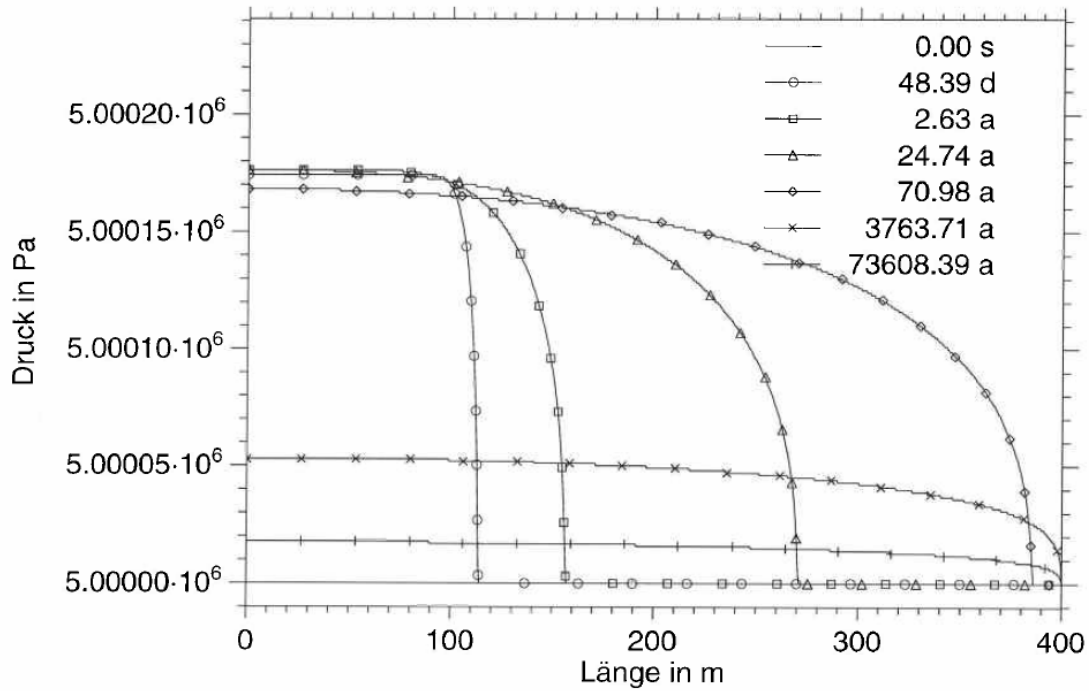


Bild 6.57: Beispiel GRS – Porengasdruck (Berechnungsmodell ohne Gasquelle) / Simulator MUFTE (Quelle: Kühle et al. (1999), Abb. 3.10)

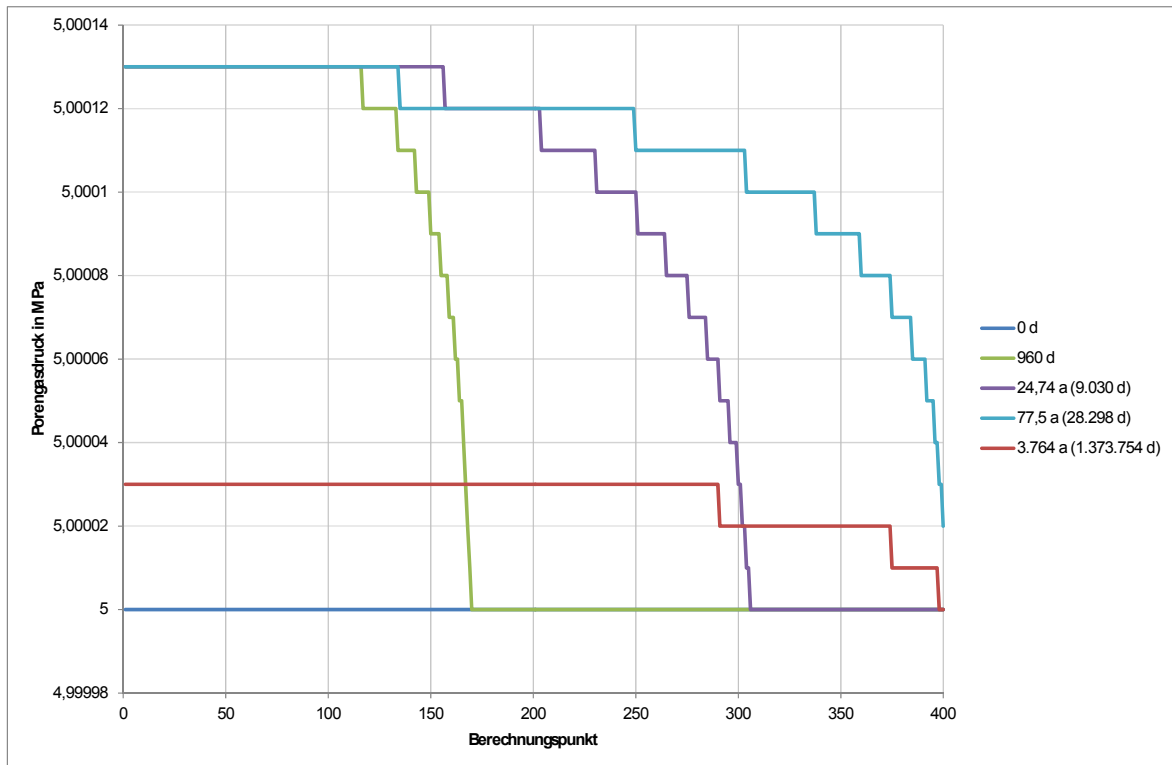


Bild 6.58: Beispiel GRS – Porengasdruck (Berechnungsmodell ohne Gasquelle) / FTK-Simulator



6.4 Erste Verifizierung des über die neu entwickelte Schnittstelle gekoppelten FTK-Simulators

6.4.1 Methodische Ansätze zur Verifizierung

Zur Verifizierung eines neu entwickelten Simulators bieten sich zwei Optionen an, mit denen die Korrektheit der Arbeitsweise des Simulators auf unterschiedlichen Ebenen überprüft werden kann. Auf der einen Seite können für vorgegebene Beispiel-Systemmodelle analytische Lösungen für die den simulierten Prozessen zugrundeliegenden Differenzialgleichungen zum Vergleich mit den entsprechenden numerischen Ergebnissen des Simulators herangezogen werden. Bei diesen Formeln kann es sich dabei schlicht um eine einzelne Gleichung wie z.B. Gleichung (5.43) handeln, zu deren Lösung ein numerischer Algorithmus im Simulator implementiert worden ist, dessen korrekte Arbeitsweise zu kontrollieren ist, oder die Formeln beschreiben geringfügig komplexere Prozesse innerhalb der Simulation, die vom Simulator korrekt im Rahmen numerischer Maßstäbe wiederzugeben sind. Analytische Differenzialgleichungslösungen existieren in der Regel aber lediglich für einfache Modellbeispiele, und insbesondere für Zweiphasenflussprozesse sind normalerweise solche Formeln selbst für den nicht gekoppelten Fall bis dato unbekannt.

Auf der anderen Seite können schon etablierte Simulatoren zu einer Vergleichsberechnung mit dem zu verifizierenden Simulator genutzt werden. Dabei können veröffentlichte Berechnungsergebnisse Dritter mit einem weiteren Simulator vorliegen oder aber auch der Simulator selbst kann zur Verfügung stehen. Für komplexere, bildhaftere und weniger abstrakte Berechnungsmodelle (mit z.B. Zweiphasenflussprozessen), für die keine analytischen Funktionen für die Entwicklung der physikalischen Prozessgrößen bekannt sind, stellt diese Methode mangels Alternative gängigerweise die einzige Verifizierungsmöglichkeit dar. Viele Simulatoren können oft jedoch jeweils nur einen Teilaspekt dessen abdecken, was zu verifizieren ist, beispielsweise nur Einphasenflussprozesse, keine Kopplung mit der Mechanik oder Einschränkungen in der Modellgeometrie oder in anderen Aspekten. Eine bekannte und erweiterte Methode zur Verifizierung von Simulatoren stellt dabei das Benchmarking dar, bei dem in der Regel mehrere Organisationen dieselben Aufgabenstellungen mit ihren jeweils eigenen oder eigens genutzten (und ggf. modifizierten) Simulatoren bearbeiten und die Ergebnisse vergleichend analysieren.

Im Rahmen des hier bearbeiteten Forschungsvorhabens ist die Verifizierung des neu entwickelten FTK-Simulators auf allen vier genannten Ebenen erfolgt:



- Die in Abschnitt 5.4 zusammengestellten analytischen Lösungen für den Einphasenfluss werden in Abschnitt 6.4.2 den Ergebnissen des FTK-Simulators vergleichend gegenübergestellt. Dabei ist sowohl die zentrale M→H-Kopplungsgleichung (5.43) verifiziert wie auch eine Überprüfung der Qualität des FTK-Simulators anhand von einfachen, eindimensionalen Beispielmodellen mit HM-Prozesskopplung vorgenommen worden (Ebenen 1 und 2).
- In Abschnitt 6.4.3 sind Vergleichsberechnungen mit FLAC^{3D} den Simulationsergebnissen des FTK-Simulators für einphasige HM-gekoppelte Prozesse gegenübergestellt und ausführlich analysiert worden (Ebene 3).
- Schließlich befasst sich Abschnitt 7 mit einem Benchmark-Beispiel, das im Rahmen der in diesem Forschungsvorhaben vereinbarten Kooperation zwischen dem LfD&G und der GRS Braunschweig aus einem Experiment im URL Mont Terri herausgearbeitet worden ist. Das DM-B-Experiment, bei dem ein Bohrloch an vorab im umgebenden Gestein installierten Porendrucksensoren vorbei abgeteuft worden ist, ist von beiden Kooperationspartnern auf jeweils ein Berechnungsmodell abgebildet und mit den Simulatoren FTK bzw. CODE_BRIGHT HM-gekoppelt simuliert worden (Ebene 4).

Darüber hinaus wird vom LfD&G konkret angestrebt, ein umfassenderes Benchmarking mit verschiedenen Kooperationspartnern durchzuführen, mit dem sowohl die Qualität des FTK-Simulators wie auch die Qualität der Simulatoren der beteiligten Partnerorganisationen im Vergleich zueinander eingeschätzt und verbessert werden kann. Organisatorische Vorarbeiten sind im Rahmen dieses Forschungsvorhabens bereits durchgeführt worden und werden in Abschnitt 8 vorgestellt.

6.4.2 Verifizierung anhand von analytisch lösbaeren Beispielmodellen

6.4.2.1 Übersicht über die Beispielmodelle

Für die Verifizierung des FTK-Simulators anhand von analytischen Formeln für einphasig-hydraulische und/oder mechanische Prozessabläufe sind eindimensionale, einfache Beispiel-Berechnungsmodelle herangezogen worden, die in Abschnitt 5.4 eingeführt worden sind. „Eindimensional“ bedeutet im Kontext von FLAC^{3D} und somit auch im Kontext des FTK-Simulators, dass das Modell in den anderen beiden Dimensionen eine Einheitsausdehnung von (hier) jeweils 1 m besitzt und in ihnen hydraulisch dicht und mechanisch unverschieblich

gelagert ist, so dass effektiv nur eine Modelldimension für die mechanischen und/oder hydraulischen Prozesse zum Tragen kommt. Unterschiedliche, eher abstrakte bzw. stark vereinfachte Szenarien sind mit diesem Modell unter entsprechender Variation von Prozessen, Parametern und Randbedingungen simuliert worden. Die anfänglichen Verschiebungen und Verzerrungen betragen stets 0, die Erdbeschleunigung und der Kapillardruck werden vernachlässigt. Für die Beschreibung der Deformationsprozesse wird das mechanische Stoffmodell nach *Hooke* in seiner isotropen Form verwendet.

Die Beispielmodelle werden hier im Einzelnen noch einmal kurz zusammengefasst und in Bild 6.59 mit ihren Randbedingungen schematisch dargestellt:

– Beispielmodell 1: Wasserundurchlässige Tragstruktur

Die 10 m lange Tragstruktur ist zu Beginn mechanisch allseitig eingespannt und wird zum Zeitpunkt $t = 0s$ auf Atmosphärendruck entlastet. Ziel dieses Modellbeispiels ist die Verifikation der in den FTK-Simulator implementierten M→H-Kopplungsbeziehung zwischen Verzerrung und Porenwasserdruck bzw. Sättigungsgrad. Zwei verschiedene Anfangswerte für den Porenwasserdruck gewährleisten die Verifikation für die beiden möglichen Fälle einer unveränderten Vollsättigung bzw. einer Teilentsättigung des Berechnungsmodells.

– Beispielmodell 2: Stark idealisiertes Gebirgsmodell

Dieselbe Tragstruktur wie im Beispielmodell 1 repräsentiert nun einen stark idealisierten Gebirgsausschnitt, an dessen einem Rand ein Hohlraum aufgeföhren wird. Erneut wird eine zu Beginn vorhandene Primärspannung unter HM-Wechselwirkungen abgebaut, und für das Porenwasser entsteht zusätzlich ein Druckgradient in Richtung des Hohlraumrandes. Ein hohlraumseitiger Abstrom des Porenwassers – unter permanentem druckerhaltendem Zustrom am gebirgsseitigen Rand – induziert nun einen HM-gekoppelten zeitabhängigen Ausbalancierungsprozess für Porenwasserdruck und Verzerrung. Dieser Prozess sowie verschiedene Teilaspekte dieses Prozesses sollen zusammen mit den zugehörigen analytischen Formeln aus Abschnitt 5.4 einer grundlegenden Verifizierung des FTK-Simulators für den Einphasenfluss dienen.

– Beispielmodell 3: Konsolidierung einer Bodenschicht, nach *Itasca (2009)*

Ein 20 m langer, in z-Richtung orientierter Bodenausschnitt, der sich von der Tagesoberfläche bis zu einem Grundwassernichtleiter erstreckt, erföhrt eine mechanische Auflast, die über die dadurch induzierte Kompaktion des Bodens im zeitlichen Verlauf zu

einer allmählichen Auspressung des Porenwassers und dadurch auch zu weiteren Setzungen führt. Dieses Modellbeispiel stellt eine Variation des vorangehenden Beispiels dar, dessen wesentlicher Unterschied die gebirgsseitige Randbedingung ist – der Zahlenwert für den Porenwasserdruck kann sich hier den Strömungsgegebenheiten anpassen.

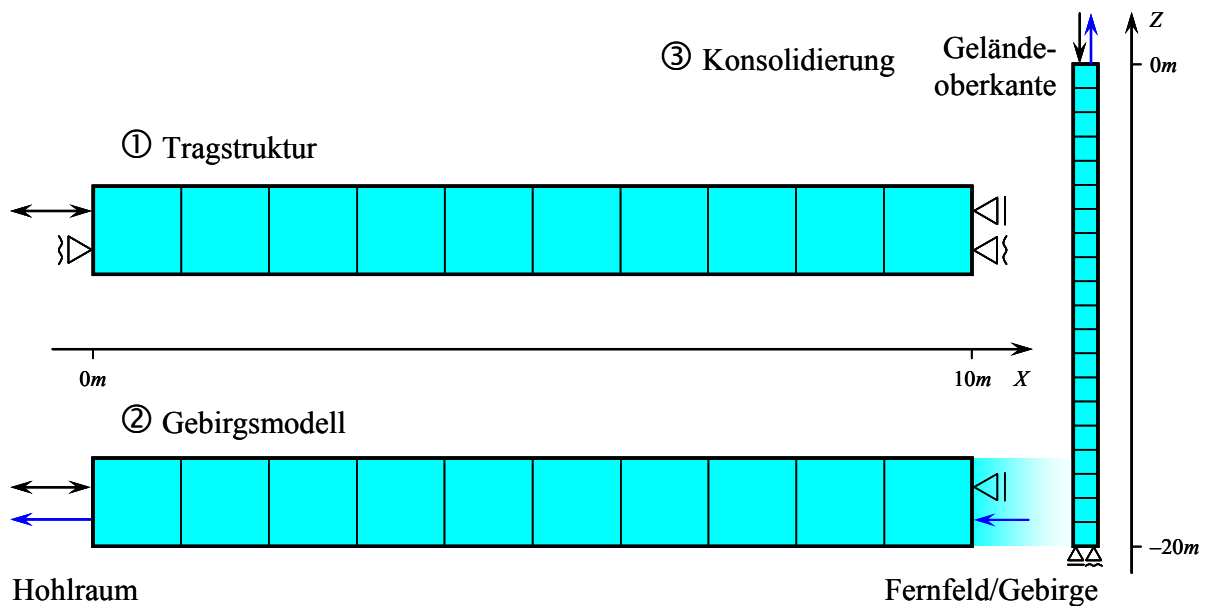


Bild 6.59: Beispielmodelle 1 bis 3 – schematische Darstellung der Randbedingungen

6.4.2.2 Mechanische Entlastung einer wasserundurchlässigen Tragstruktur

Das aus zehn in x-Richtung aneinandergereihten würfelförmigen Zonen mit jeweils 1m Kantenlänge aufgebaute Modell ist überall wasserundurchlässig, homogen sowie zu Beginn vollgesättigt. Strömungsprozesse finden somit nicht statt (das Programm TOUGH2 wird hier also auch nicht aufgerufen), und das Modell beinhaltet auch keine Fluidquellen. Zu Beginn der Simulation ist das Modell mit einer totalen Spannung von $\sigma_p = 10 \text{ MPa}$ horizontal vorbelastet, direkt im Anschluss wird diese Vorbelastung dann aber am linken Rand auf $\sigma_H = p_{atm} = 0,1013 \text{ MPa}$ bei unverschieblichem rechtem Rand abgesenkt ($\Delta\sigma_{tot} = \sigma_H - \sigma_p$), so dass diese sekundäre Totalspannung dann im gesamten Modell vorherrscht. Der Porenwasserdruck beträgt zu Beginn in zwei unterschiedlichen Berechnungsvariationen $p_p = 8 \text{ MPa}$ bzw. $p_p = 2 \text{ MPa}$, der Referenzporendruck für die Gasphase liegt bei $p_{g,ref} = p_{atm}$. Die er-



forderlichen Materialparameter besitzen die Zahlenwerte $E = 10.000 \text{ MPa}$, $\nu = 0$, $\phi = 10\%$, $\alpha = 1$ und $\check{K}_l = 2.000 \text{ MPa}$ ($\Rightarrow \check{M}_l = 20.000 \text{ MPa}$).

Aufgrund der gleichförmigen mechanischen Entlastung expandiert das Berechnungsmodell in allen Zonen gleichmäßig. Auch der Porenraum vergrößert sich im vorliegenden hydraulisch dichten System bei diesem Prozess, so dass sich der Porenwasserdruck dabei ebenfalls gleichmäßig absenkt. Die analytischen Entwicklungen von Porenwasserdruck p_l , Verschiebung u und Sättigung S_l werden aus den Gleichungen (5.51a/b) und (5.52a/b) erhalten und lauten für den Fall, dass das Modell wassergesättigt bleibt ($S_l(X) \equiv 1$):

$$p_l(X) \equiv p_p + \frac{\alpha \check{M}_l}{E + \alpha^2 \check{M}_l} \Delta \sigma_{tot} \quad (6.16a)$$

$$u(X) = \left(e^{\frac{\Delta \sigma_{tot}}{E + \alpha^2 \check{M}_l}} - 1 \right) (X - 10m) \quad (6.16b)$$

und für den Fall der Teilentsättigung ($p_l(X) \equiv p_{g;ref}$):

$$S_l(X) \equiv e^{\frac{\alpha \check{M}_l \Delta \sigma_{tot} - (E + \alpha^2 \check{M}_l)(p_{g;ref} - p_p)}{\phi E \check{M}_l}} \quad (6.16c)$$

$$u(X) = \left(e^{\frac{\alpha(p_{g;ref} - p_p) - \Delta \sigma_{tot}}{E}} - 1 \right) (X - 10m) \quad (6.16d)$$

Aus den gegebenen Zahlenwerten wird gemäß Gleichung (6.16a) eine entlastungsinduzierte Porenwasserdruckänderung von $\Delta p_l = p_l(X) - p_p \equiv -6,5991 \text{ MPa}$ erhalten, so dass bei der ersten Berechnungsvariation mit $p_p = 8 \text{ MPa}$ die Vollsättigung erhalten bleibt, während der Zustand bei der zweiten Variation mit $p_p = 2 \text{ MPa}$ in den Bereich der Teilsättigung übergeht. Somit ergeben sich für den ersten Fall ein analytischer Porenwasserdruck von

$$p_l = 1,4009 \text{ MPa}$$

und eine lineare Verteilung der Verschiebung, insbesondere mit einem Zahlenwert von

$$u(0m) = -3,3001 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

für den linken Modellrand. Bild 6.60 zeigt das rechnerische Resultat in Form von Graphen und eines Flächenplots für die Verschiebung in x-Richtung. In der Legende angegeben sind dabei ebenfalls die durch die Berechnung erhaltene zahlenmäßige Spannweite für den Porenwasserdruck und die Sättigung im gesamten Modell, wobei diese Zahlenwerte bei der Darstellung der entsprechenden Flächenplots durch das Programm FLAC^{3D} im Gegensatz zu den Verschiebungen aus zonalen Mittelwerten interpoliert werden und damit generell nicht notwendigerweise mit zugehörigen analytischen Zahlenwerten übereinstimmen müssen. Die rechnerischen Resultate werden in diesem Abschnitt 6.4.2 generell durch eine durchgezogene, dünnere und farblich dunklere Kurve wiedergegeben, während der Graph der analytischen Lösung gestrichelt, etwas dicker und heller dargestellt ist.

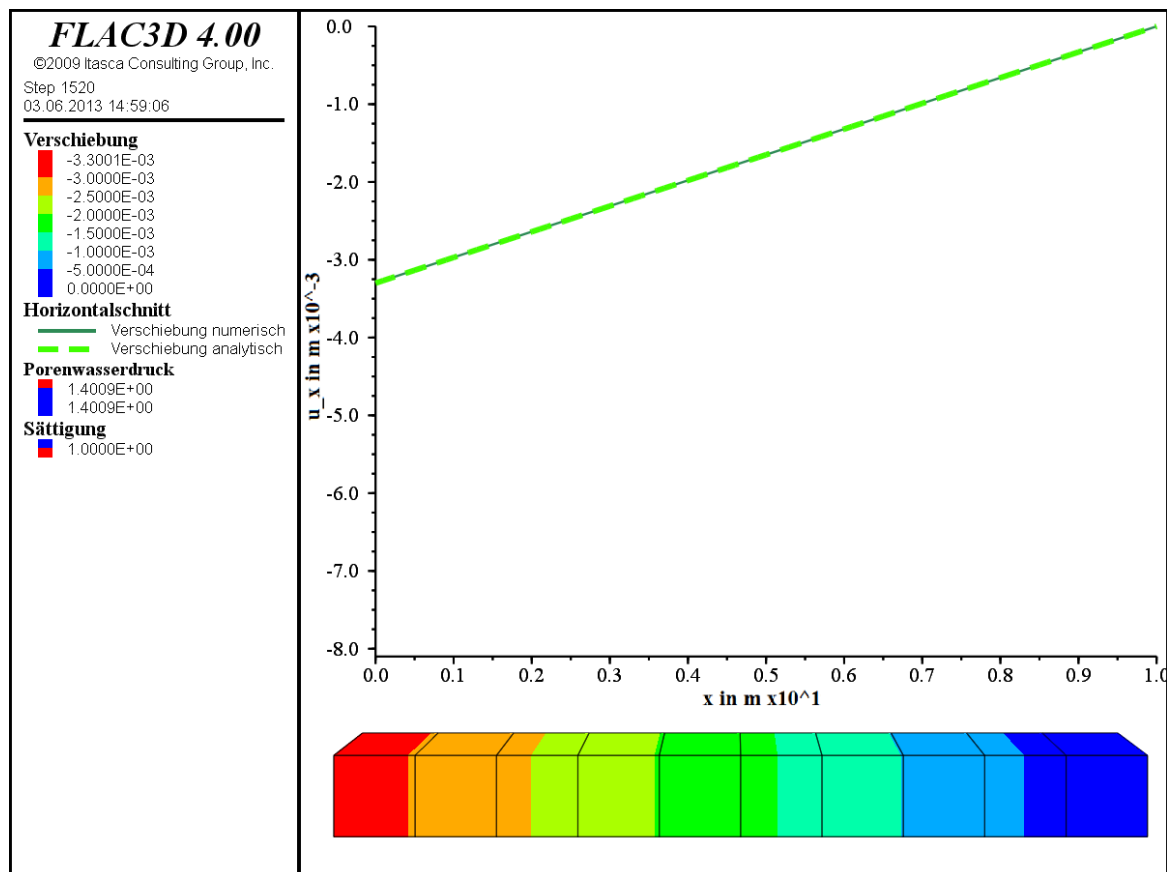


Bild 6.60: Berechnungsergebnisse zum Beispielmodell 1, Berechnungsvariation 1 (Erhalt der Vollsättigung / $p_p = 8 \text{ MPa}$) – instantane Verschiebungsverteilung (Plots) sowie instantane Zahlenwerte für Porenwasserdruck und Sättigung (Legende)

Wie Bild 6.60 entnommen werden kann, sind bei der Berechnung durch den gekoppelten FTK-Simulator keine numerisch bedingten Inhomogenitäten in den Ergebnissen entstanden, d.h. das Material verhält sich wie erwartet in allen Zonen gleichartig, und die analytische Lö-

sung wird durch die numerische Berechnung in diesem einfachen Beispiel sehr gut wiedergegeben. Die Zahlenwerte in der Legende, deren Einteilung von FLAC^{3D} automatisch anhand der auftretenden Minimal- und Maximalwerte vorgenommen worden ist, stimmen exakt mit den beiden oben angegebenen formelmäßig berechneten Sollwerten überein (bei Porendruck und Sättigung aufgrund der Tatsache, dass ihre Verteilungen konstant sind, was sich auch auf die angesprochene Interpolation in FLAC^{3D} auswirkt).

Für die zweite Berechnungsvariation mit $p_p = 2 \text{ MPa}$ werden nach Gleichung (6.16c/d) eine Wassersättigung von

$$S_l = 99,2974\%$$

sowie eine räumlich lineare Verschiebung mit einem akkumulierten Zahlenwert von

$$u(0m) = -8,0032 \cdot 10^{-3} m$$

am linken Modellrand erhalten.

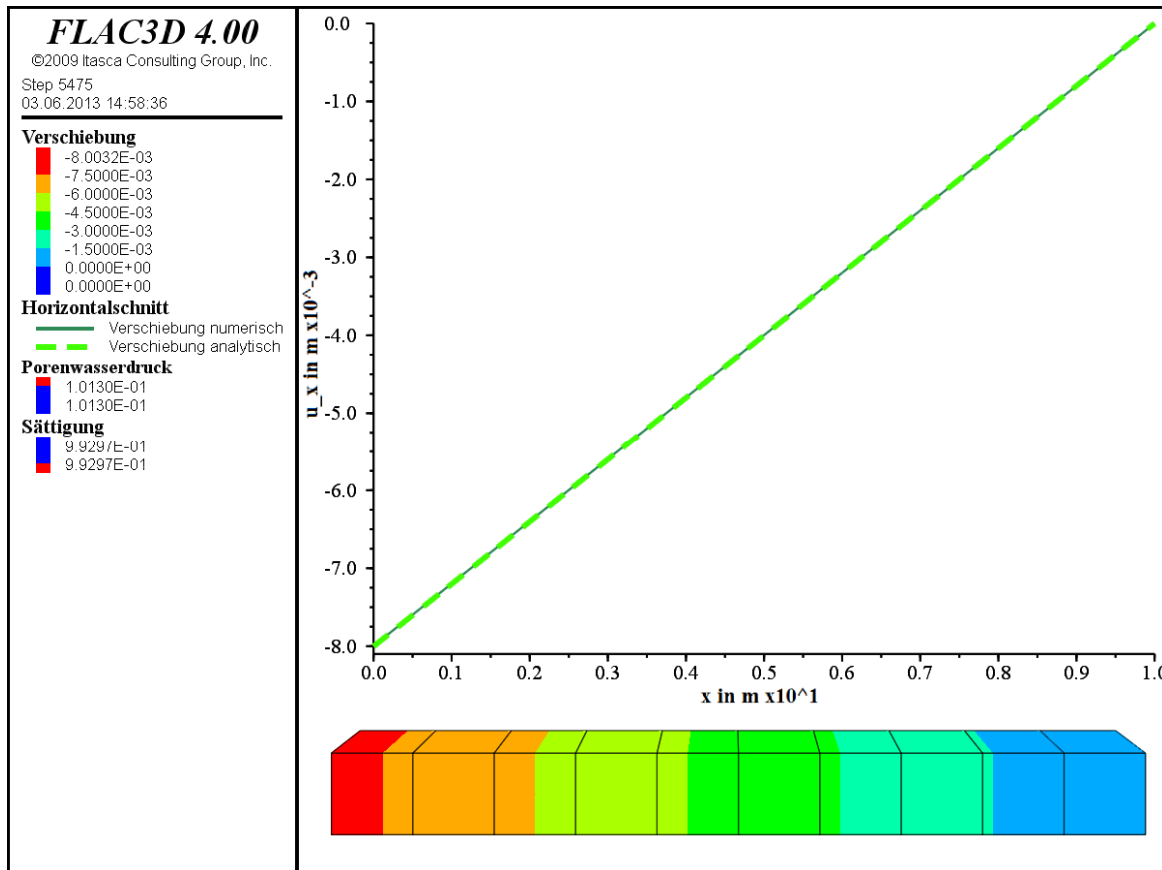


Bild 6.61: Berechnungsergebnisse zum Beispielmmodell 1, Berechnungsvariation 2 (Teilent-sättigung / $p_p = 2 \text{ MPa}$) – instantane Verschiebungsverteilung (Plots) sowie instantane Zahlenwerte für Porenwasserdruck und Sättigung (Legende)

Im Vergleich zur ersten Variation ist bei der zweiten Variation eine größere Expansion des Modells zu erwarten, da aufgrund des hier zu kleinen Spielraumes für die Porenwasserdruckabsenkung ein geringerer Anteil der Änderung der totalen Spannungen (in Zugrichtung) auf das Porenfluid und somit ein größerer Anteil auf das Korngerüst wirkt und dieses weiter entzerrt. Bild 6.61 bestätigt diese Erwartung und zeigt zudem erneut eine sehr gute Übereinstimmung von numerischem und analytischem Ergebnis. Doppelt auftretende Zahlenwerte in der Legende sind wie bereits in Bild 6.60 auf numerische Ungenauigkeiten in für den Betrachter nicht sichtbaren Dezimalstellen zurückzuführen.

Insgesamt kann die in den FTK-Simulator implementierte Gleichung (5.43) zur Kopplung der mechanischen und der hydraulischen Prozesse damit für Einphasenflussberechnungen als generell funktionstüchtig und verifiziert angesehen werden.

6.4.2.3 Stark idealisiertes Gebirgsmodell mit Hohlraumausbruch (HM-Entlastung)

Das zweite Berechnungsmodell ist sehr ähnlich zu dem vorangehenden aufgebaut (ggf. mit einer verfeinerten Unterteilung von einzelnen Modellzonen, siehe weiter unten), jedoch bildet es hier stark vereinfacht einen Gebirgsausschnitt ab mit

- Hohlraumauffahrung (mechanische Entlastung und Porenwasserdruckabsenkung auf Atmosphärendruckniveau) auf der linken Seite und
- Fernfeld-Gebirgsbedingungen (Unverschieblichkeit und Fixierung des primären Porendruckes) auf der rechten Seite

und umfasst auch zeitliche Entwicklungen der betrachteten physikalischen Größen. Das Berechnungsmodell ist homogen aufgebaut und zu Beginn wassergesättigt mit einem primären Porenwasserdruck von $p_p = 10 \text{ MPa}$ sowie mechanisch eingespannt mit einer totalen Spannung von $\sigma_p = 12 \text{ MPa}$. Am Hohlraumrand erfolgt zum Zeitpunkt $t = 0 \text{ s}$ eine auffahrungsbedingte Entlastung mit Spannungsabbau auf $\sigma_H = p_{atm} = 0,1013 \text{ MPa}$ und Porendruckabbau auf ebenfalls $p_H = p_{atm}$ statt, während der Porendruck am Fernfeldrand auf dem primären Zahlenwert fixiert bleibt. Sowohl bei der anfänglichen instantanen Expansion des Modells wie auch während der durch die vorstehend genannten Porendruckrandbedingungen induzierten Strömungsprozesse bleibt dabei die Vollsättigung erhalten. Neben den für das vorangehende Modellbeispiel bereits gesetzten Materialparametern $E = 10.000 \text{ MPa}$, $\nu = 0$,



$\phi = 10\%$, $\alpha = 1$ und $\tilde{M}_l = 20.000 \text{ MPa}$ wird die Mobilität $k_l = 10^{-9} \text{ m}^2 / (\text{MPa} \cdot \text{s})$ für den zeitlichen Strömungsprozess verwendet.

Durch den Primärspannungsabbau wird wie im vorangehenden Modell instantan eine räumlich gleichmäßige Expansion des Gebirges verbunden mit einem ebenfalls gleichmäßigen Porendruckabbau erhalten, wobei sich der auf diese Weise neu ergebende Porenwasserdruck aufgrund der erhaltenen Vollsättigung auf einem Niveau zwischen dem Atmosphärendruck und dem primären Porenwasserdruck, also zahlenmäßig zwischen den beiden Randwerten befindet. Im Verlauf der Zeit strömt hier daher gebirgsseitig Porenwasser in das Modell hinzu, erhöht den Porendruck, senkt damit die effektiven Spannungen und induziert eine weitere Modellexpansion in der Nähe des rechten Modellrandes, während hohlraumseitig Porenwasser aus dem Modell abströmt und in der entgegengesetzten Logik zu einer Rekompaktion der dortigen Modellzonen führt. Schließlich pendelt sich ein hydraulisch-mechanisch stationärer Zustand mit einer gleichmäßigen Porenwasserströmung und ohne weitere Verschiebungen ein.

Die hier betrachteten Zustände und Zustandsentwicklungen sind

- der sich instantan ausbildende Zustand,
- der transiente Zustand mit zeitlicher Porendruck- und Deformationsentwicklung sowie
- der stationäre Zustand

und werden sowohl HM-gekoppelt wie auch zunächst unter Vernachlässigung mechanischer Deformationsprozesse betrachtet. Die theoretischen Entwicklungen von Porenwasserdruck p_l , Verschiebung u und Sättigung S_l werden – zum Teil als Näherung für den Fall kleiner Deformationen – aus den Gleichungen (5.51a/b), (5.56a/c) bzw. (5.54) und (5.53a/b) erhalten und ergeben sich zu

(1) für die instantane Ausbalancierung:

$$p_l^{el}(X) \equiv p_p + \frac{\alpha \tilde{M}_l}{E + \alpha^2 \tilde{M}_l} \Delta \sigma_{tot} \quad (\rightarrow \text{nur H: } p_l^{el}(X) \equiv p_p) \quad (6.17a)$$

$$u^{el}(X) = \left(e^{\frac{\Delta \sigma_{tot}}{E + \alpha^2 \tilde{M}_l}} - 1 \right) (X - 10m), \quad (6.17b)$$

(2) für die zeitliche Entwicklung (mit $c_i = p_P - p_i^{el}$ für i ungerade und $c_i = p_i^{el} - p_H$ für i gerade sowie mit $a = (k_l E \check{M}_l) / (E + \alpha^2 \check{M}_l)$ im HM-gekoppelten und $a = k_l \check{M}_l$ im hydraulischen Fall):

$$p_l(t; X) \approx p_H + c_0 \operatorname{erf}\left(\frac{X}{\sqrt{4at}}\right) + \sum_{i=1}^{\infty} c_i \left(\operatorname{erf}\left(\frac{i \cdot 10m + X}{\sqrt{4at}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i \cdot 10m - X}{\sqrt{4at}}\right) \right) \quad (6.17c)$$

$$\left(\rightarrow \text{nur H: } = p_H + (p_P - p_H) \left(\operatorname{erf}\left(\frac{X}{\sqrt{4at}}\right) + \sum_{i=1}^{\infty} \left(\operatorname{erf}\left(\frac{i \cdot 20m + X}{\sqrt{4at}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i \cdot 20m - X}{\sqrt{4at}}\right) \right) \right) \right)$$

$$\varepsilon(t; X) \approx \frac{\Delta\sigma_{tot} + \alpha(p_P - p_l(t; X))}{E}, \quad (6.17d)$$

(3) für den stationären Zustand:

$$p_l(\infty; X) \approx (p_P - p_H) \frac{X}{10m} + p_H \quad \left(\rightarrow \text{nur H: exakte Gleichheit} \right) \quad (6.17e)$$

$$u(\infty; X) \approx \frac{E \cdot 10m}{\alpha(p_P - p_H)} \cdot e^{-\frac{\Delta\sigma_{tot}}{E}} \left(e^{\frac{\alpha(p_P - p_H)}{E} \left(\frac{X}{10m} - 1 \right)} - 1 \right) + (10m - X). \quad (6.17f)$$

Mit den gegebenen Zahlenwerten werden somit für den instantanen Porenwasserdruck und die instantane Verzerrung sowie für die instantane und die stationäre Verschiebung am beweglichen Modellrand aus Gleichung (6.17a/b/d/f) die folgenden analytisch ermittelten Zahlenwerte für den HM-gekoppelten Fall erhalten:

$$\begin{aligned} p_l^{el} &= 2,0675 \text{ MPa} \\ \varepsilon^{el} &= -3,9662 \cdot 10^{-4} \\ u^{el}(0m) &= -3,9670 \cdot 10^{-3} \text{ m} \\ u(\infty; 0m) &\approx -6,9522 \cdot 10^{-3} \text{ m} \end{aligned}$$

Bild 6.62 zeigt, dass die analytisch ermittelten instantanen Deformationen und die daran gekoppelte Porenwasserdruckabnahme korrekt vom FTK-Simulator wiedergegeben werden. Für den Fall von lediglich hydraulischen Prozessen gibt es keine veränderten Zustandsgrößen für eine Verifizierung, da gemäß Gleichung (6.17a) ohne mechanische Lastabnahme instantan auch kein hydraulischer Vorgang stattfindet. Entsprechend beginnt dort auch die anschließen-

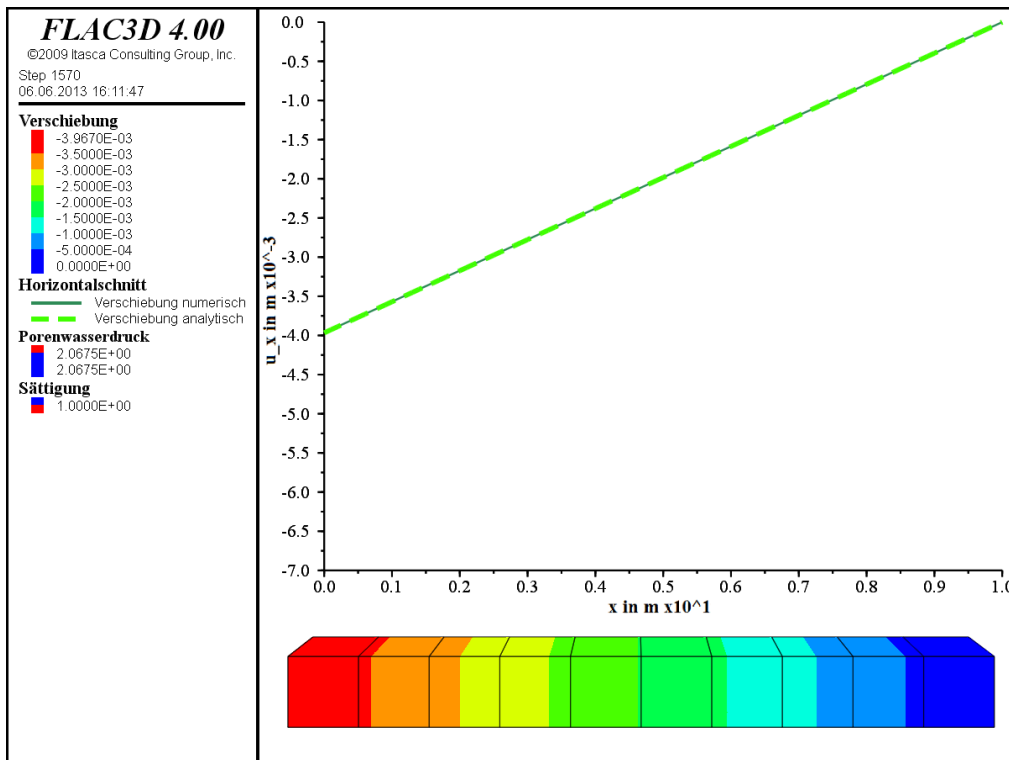


Bild 6.62: Berechnungsergebnisse zum Beispielmodell 2, HM-gekoppelte Berechnung – instantane Verschiebungsverteilung (Plots) sowie instantane Zahlenwerte für Porenwasserdruck und Sättigung (Legende)

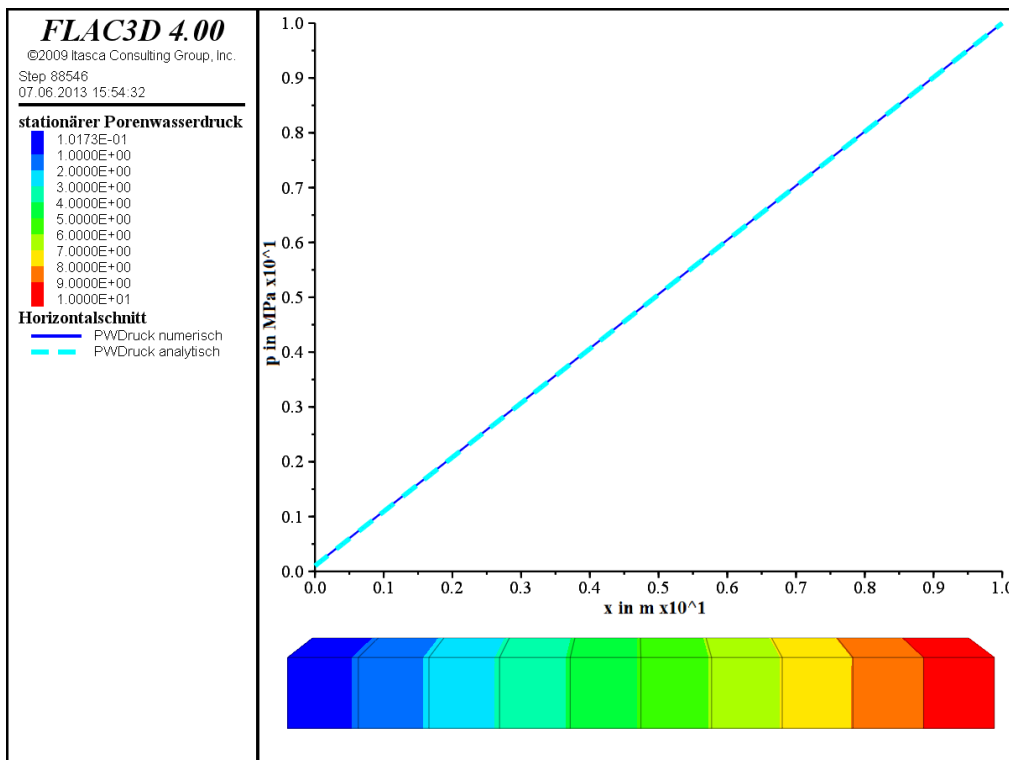


Bild 6.63: Berechnungsergebnisse zum Beispielmodell 2, hydraulische sowie HM-gekoppelte Berechnungen – stationäre Porenwasserdruckverteilung

de zeitabhängige Porenwasserdruckentwicklung in allen Zonen des Berechnungsmodells mit einem Anfangswert von $p_p = 10 \text{ MPa}$ anstelle von $p_i^{el} = 2,0675 \text{ MPa}$ bei gleichem stationären Zielzustand, der in Bild 6.63 abgebildet ist.

Die in den folgenden Bildern dargestellten Graphen beziehen sich auf die von links nach rechts durchnummerierten „Würfel“ 1 bis 10 des geometrischen Modells, welche bislang den würfelförmigen Modellzonen entsprochen haben. Um die in unmittelbarer Nähe des hohlraumseitigen und ggf. auch des gebirgsseitigen Modellrandes ablaufenden Prozesse, die zu Simulationsbeginn durch große Porenwasserdruckgradienten und daher durch große Zustandsänderungen gekennzeichnet sind, genauer abbilden und damit hinsichtlich der numerischen Qualität der Simulation beurteilen zu können, ist für die zeitabhängige Simulation nun aber die jeweils äußere Modellzone in x-Richtung in sieben gleich schmale Zonen unterteilt worden. Diese verfeinerte Diskretisierung wird in Bild 6.64 veranschaulicht. Für die Zuordnung der Graphen zu den Zonen zählen die auf diese Weise unterteilten Zonen dabei jedoch stets als jeweils ein einzelner Würfel, wobei die Zahlenwerte für die Graphen aus der jeweils mittleren Zone der verfeinerten Unterteilung genommen worden sind.

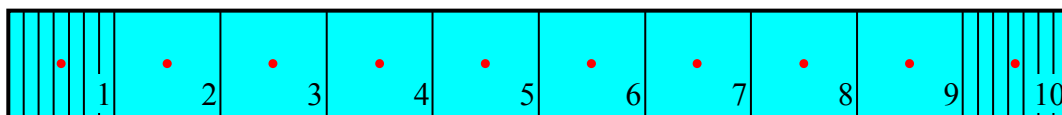


Bild 6.64: Unterteilung der Struktur in würfelförmige Elemente mit randlicher Verfeinerung der Diskretisierung und Nummerierung dieser Würfel für die folgenden Bilder: Die physikalischen Größen für die mit einem Punkt markierten Zonen werden als Repräsentant für den entsprechenden Würfel 1 bis 10 verwendet.

In Bild 6.65 sind nun die aus der rechnerischen Simulation erhaltenen zeitlichen Verläufe der Porenwasserdrücke aller zehn Würfel des Berechnungsmodells den analytischen Lösungen aus Gleichung (6.17c) für hydraulische Prozesse gegenübergestellt. Wie aus Bild 6.65 ersehen werden kann, besteht prinzipiell eine gute Übereinstimmung von numerischen und analytischen Kurvenverläufen. Dabei fällt einerseits auf, dass die mit TOUGH2 berechneten Graphen tendenziell geringfügig höhere Zahlenwerte für die Porenwasserdrücke aufweisen und die simulierten Strömungsprozesse damit sozusagen langsamer abzulaufen scheinen als die Theorie es suggeriert, was andererseits aber offenbar auf die Diskretisierung zurückzuführen ist – die Übereinstimmung von numerischem und analytischem Kurvenverlauf ist für die beiden Würfel 1 und 10, bei denen die numerischen Porendrucke de facto aus je einer verfeiner-

ten Zone stammen, deutlich besser als für die übrigen acht Würfel. Der hinsichtlich der Prozesse ungekoppelte hydraulische Prozessablauf wird also vom Simulator TOUGH2 ohne weiteren Eingriff in die Zeitschrittsteuerung seitens des Benutzers oder des FTK-Simulators zahlenmäßig korrekt wiedergegeben.

Bei der HM-gekoppelten Simulation ist hingegen eine Steuerung der Kopplungsfrequenz (Aufrufhäufigkeit von TOUGH2) und damit der Zeitschritte erforderlich gewesen. Aufgrund der zu Berechnungsbeginn stellenweise hohen Druckgradienten würde eine zu niedrige Kopplungsfrequenz, also ein zu großer Zeitschritt, zu sehr starken Schwankungen der aufgezeichneten Zustandswerte führen – der Porenwasserdruck am linken Rand würde durch die hohlraumwärtigen Strömungsprozesse stark abgebaut und durch die auf diese Weise induzierte Kompaktion des Materials nachfolgend stark wiederaufgebaut werden. Für eine eher quantitativ orientierte Simulation, wie sie hier im Zuge der Verifizierung des FTK-Simulators vorzunehmen ist, ist daher ein dementsprechend eher kleiner Zeitschritt für den überwiegenden Zeitbereich der Simulation anzusetzen gewesen, so dass für das vorliegende einfache Modell bei einer Verwendung von Zeitabschnitten im Bereich von $\Delta t = 0,01d$ bis $0,1d$ und einem simulierten Zeitraum von 140 Tagen die Berechnungsdauer mit einigen Minuten vergleichsweise lang erscheint.

Die Resultate der HM-gekoppelten zeitabhängigen Simulation mit dem FTK-Simulator sind zusammen mit den entsprechenden analytischen Kurven in den Bildern 6.66 und 6.67 dargestellt. Bild 6.67 zeigt sowohl den allen Zonen gemeinsamen instantanen Porendruckabbau auf $p_i^{el} = 2,0675 \text{ MPa}$ wie auch die zeitliche Entwicklung der Porendrücke in den einzelnen Würfeln in Richtung der stationären Zielwerte aus Bild 6.63 oder Bild 6.65(a). Aufgrund der Komplexität der Gleichung (5.56b) für die zeitlichen Verschiebungsverläufe sind in Bild 6.66 anstelle der Verschiebungen die Verzerrungen im Verlauf der Zeit abgebildet, wobei die numerischen Zahlenwerte aus den logarithmischen Volumenverzerrungen berechnet worden sind, die im eindimensionalen Fall identisch mit den wahren Verzerrungen in Modellrichtung sind. Auch hier ist die instantane Expansion des geometrischen Modells auf den weiter oben angegebenen einheitlichen Zahlenwert von $\varepsilon^{el} = -3,9662 \cdot 10^{-4}$ aufgrund der mechanischen Entlastung am linken Modellrand zu erkennen, bevor der strömungsinduzierte lokale Porendruckanstieg bzw. -abfall zu einer dementsprechend entgegengesetzten Bewegung der Verzerrungskurve führt (ein erhöhter Porendruck übernimmt einen größeren Beanspruchungsanteil und entlastet damit das Mineralkorngerüst und umgekehrt).

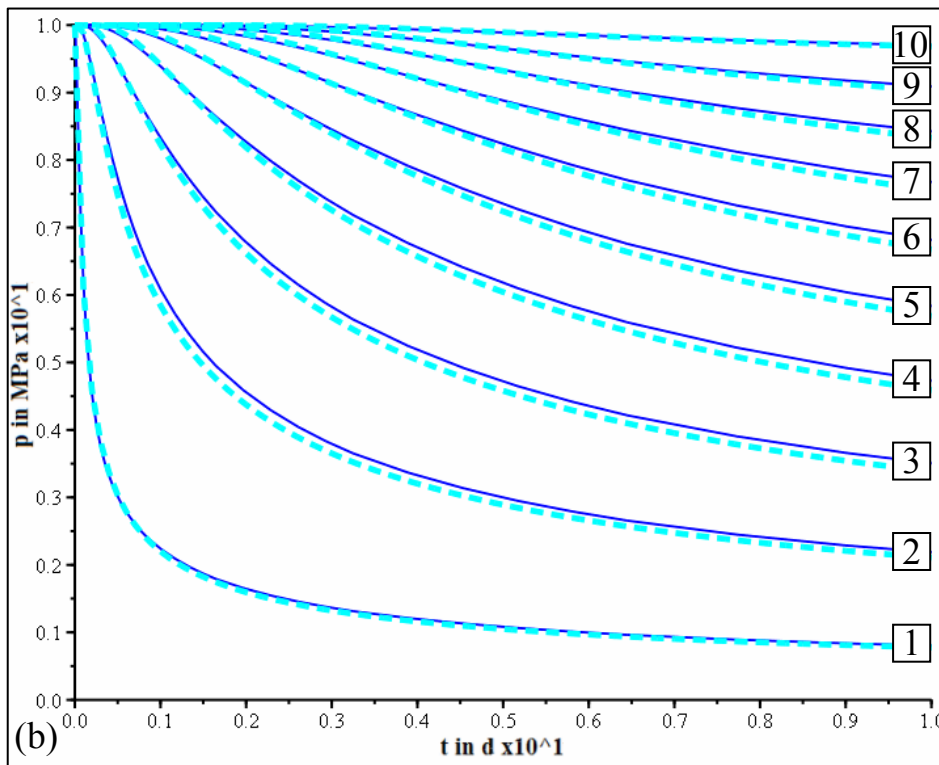
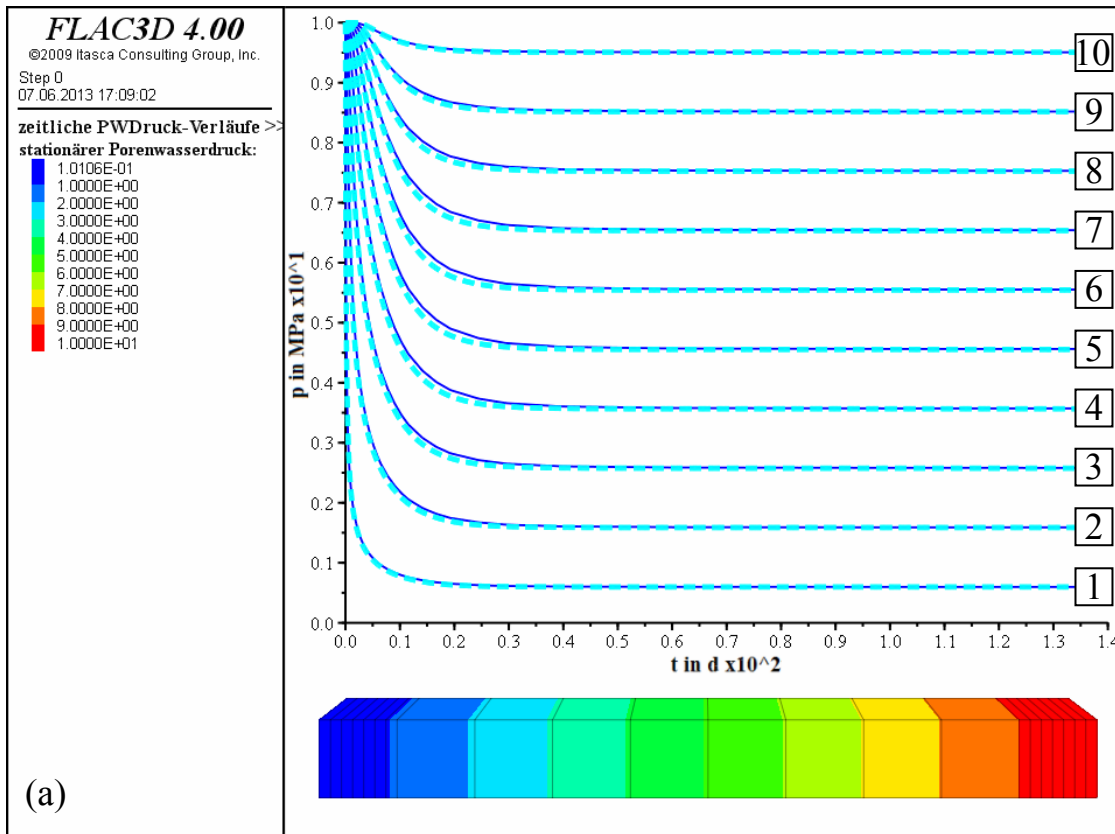


Bild 6.65: Berechnungsergebnisse zum Beispielmodell 2, **hydraulische Berechnung** – Porenwasserdrücke in allen zehn Würfeln des Modells im Verlauf (a) von 140 Tagen und (b) der ersten 10 Tage

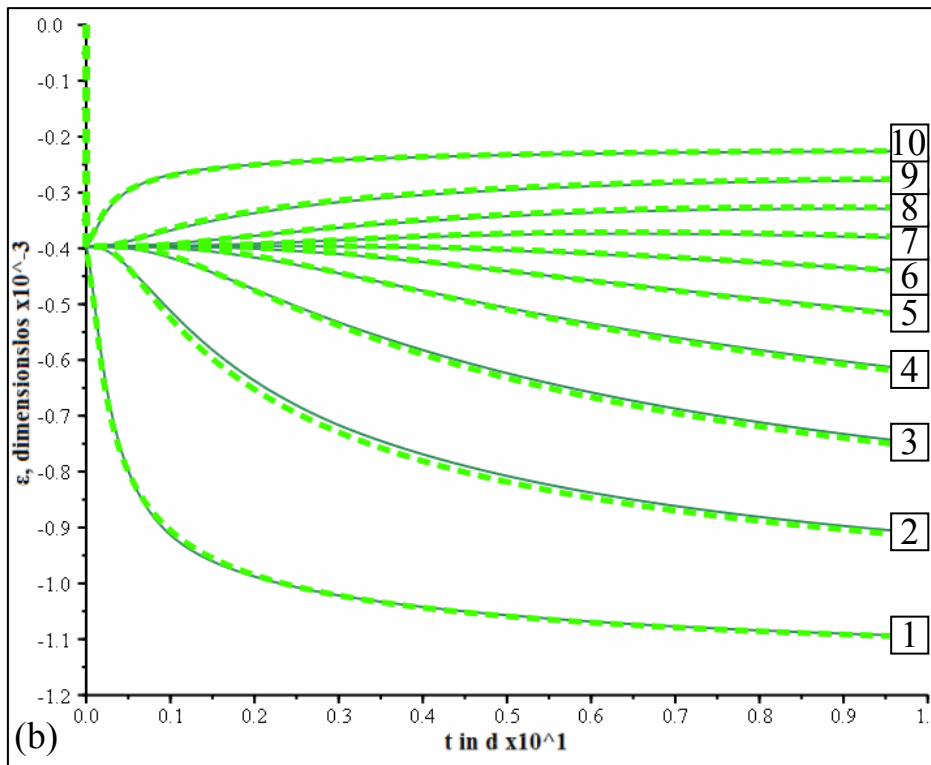
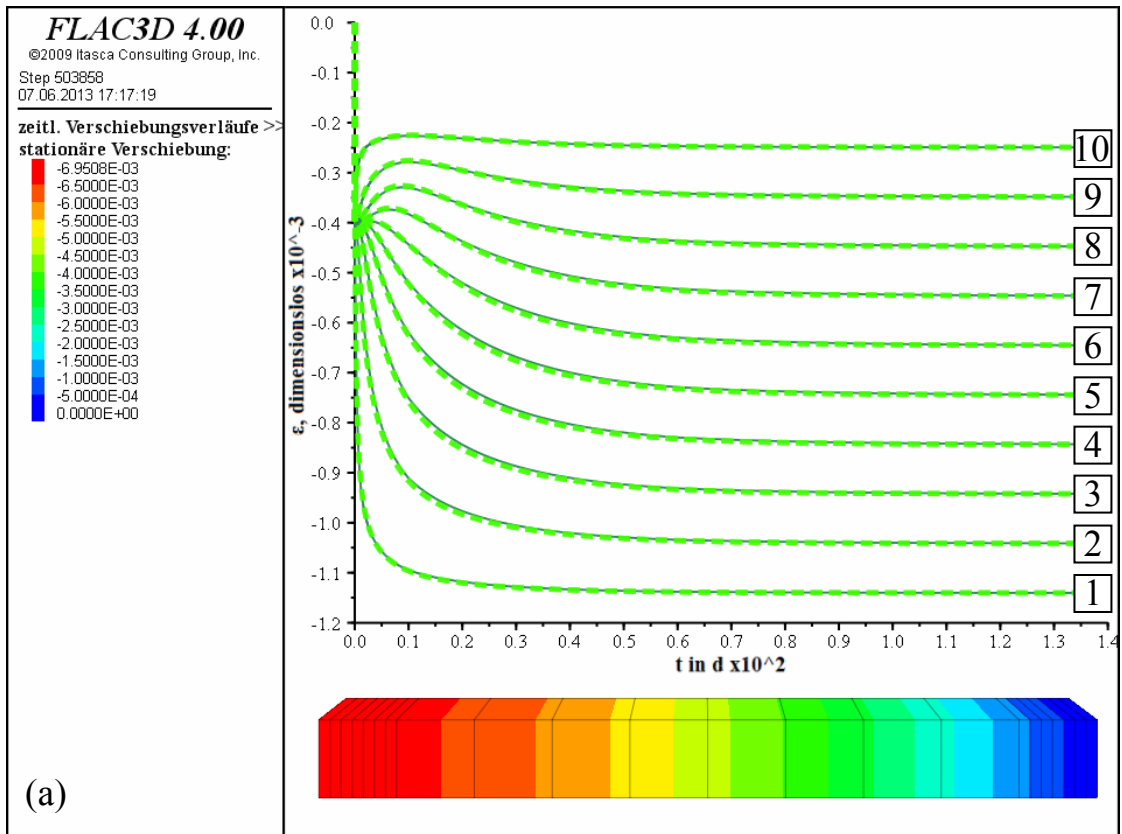


Bild 6.66: Berechnungsergebnisse zum Beispielmodell 2, **HM-gekoppelte Berechnung** – Verzerrungen in allen zehn Würfeln des Modells im Verlauf (a) von 140 Tagen und (b) der ersten 10 Tage

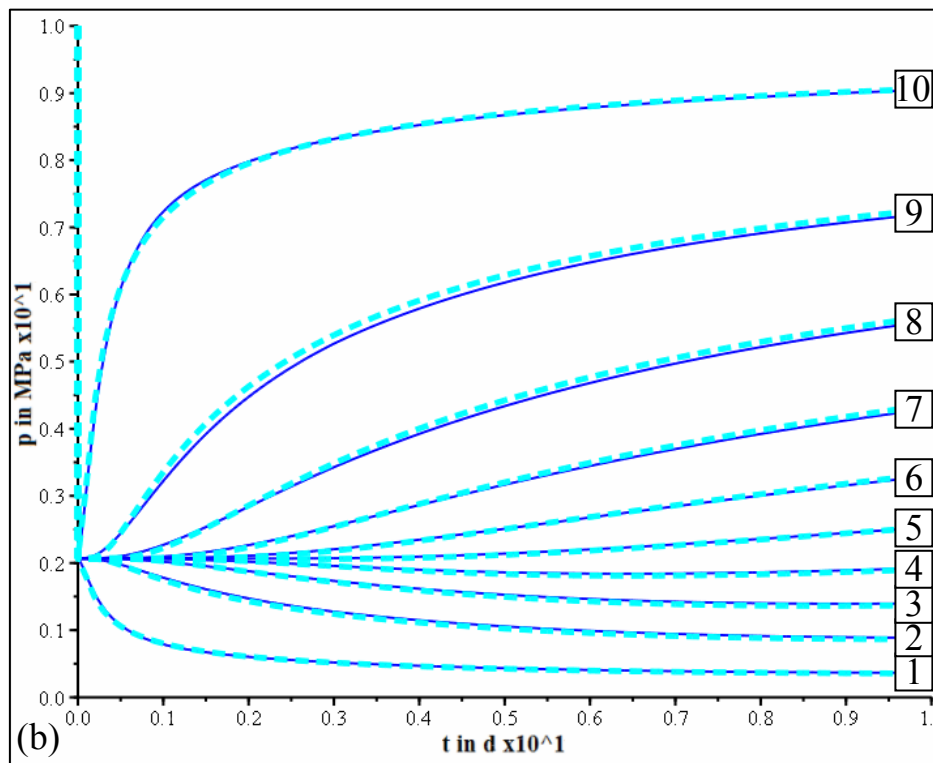
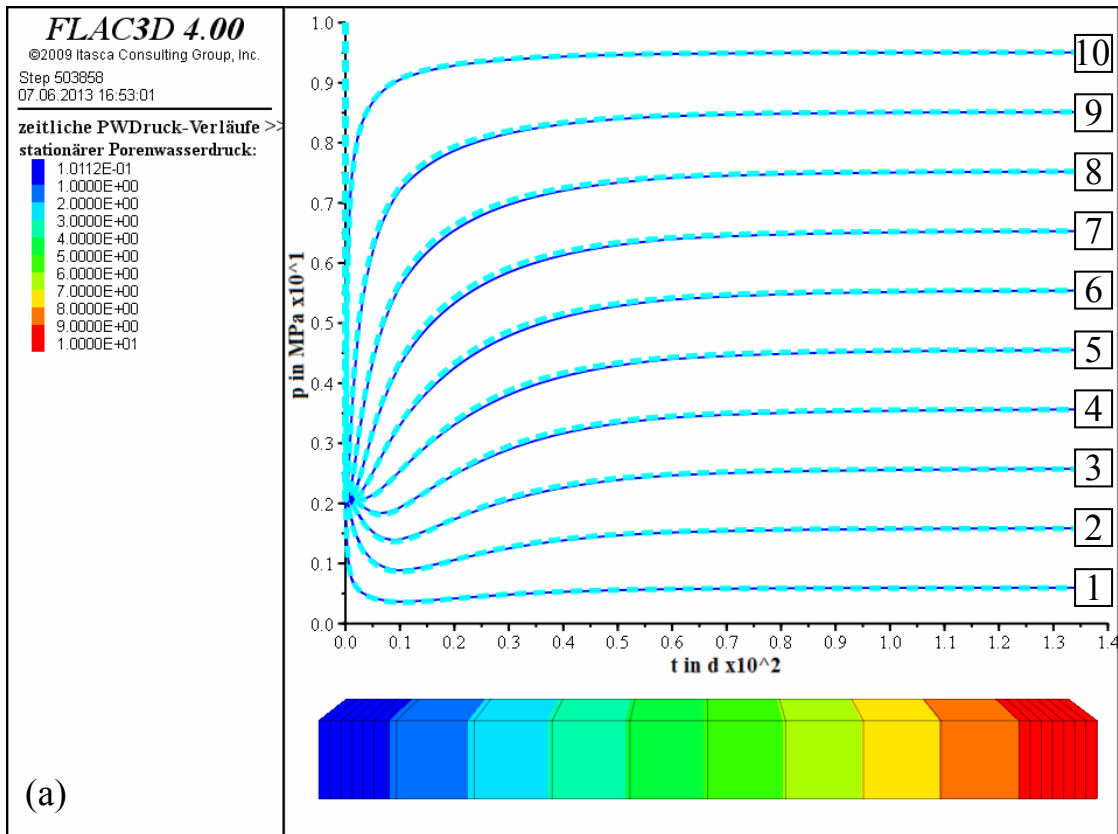


Bild 6.67: Berechnungsergebnisse zum Beispielmodell 2, **HM-gekoppelte Berechnung** – Porenwasserdrücke in allen zehn Würfeln des Modells im Verlauf (a) von 140 Tagen und (b) der ersten 10 Tage

Es zeigt sich bei den Simulationsergebnissen für die HM-gekoppelten zeitlichen Prozesse am Beispielmodell 2 ein sehr ähnliches Verhalten wie in den Ergebnissen für die lediglich hydraulischen Prozesse aus der vorangehenden Berechnung. Die Übereinstimmung der mit dem FTK-Simulator berechneten Porenwasserdrücke und Verzerrungen mit den analytischen Kurvenverläufen ist insgesamt gut und insbesondere in den feiner diskretisierten Bereichen wiederum sehr gut. Für eine exakte Übereinstimmung des Endwertes für die Verschiebung am Hohlraumrand mit dem analytischen Zahlenwert von $u(\infty;0m) \approx -6,9522 \cdot 10^{-3} m$ ist der stationäre Zustand möglicherweise nach dem simulierten Zeitraum von 140 Tagen noch nicht hinreichend gut erreicht worden oder aber der Endwert unterliegt numerischen Ungenauigkeiten. Der über eine gröbere Zeitschrittsteuerung numerisch erhaltene stationäre Zustand für die Verschiebung im gesamten Berechnungsmodell, bei dem nach Bild 6.68 ähnliche Ungenauigkeiten bei der Verschiebung im Hohlraumrand auftreten, zeigt gleichwohl eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung und relativiert damit die beobachteten Ungenauigkeiten.

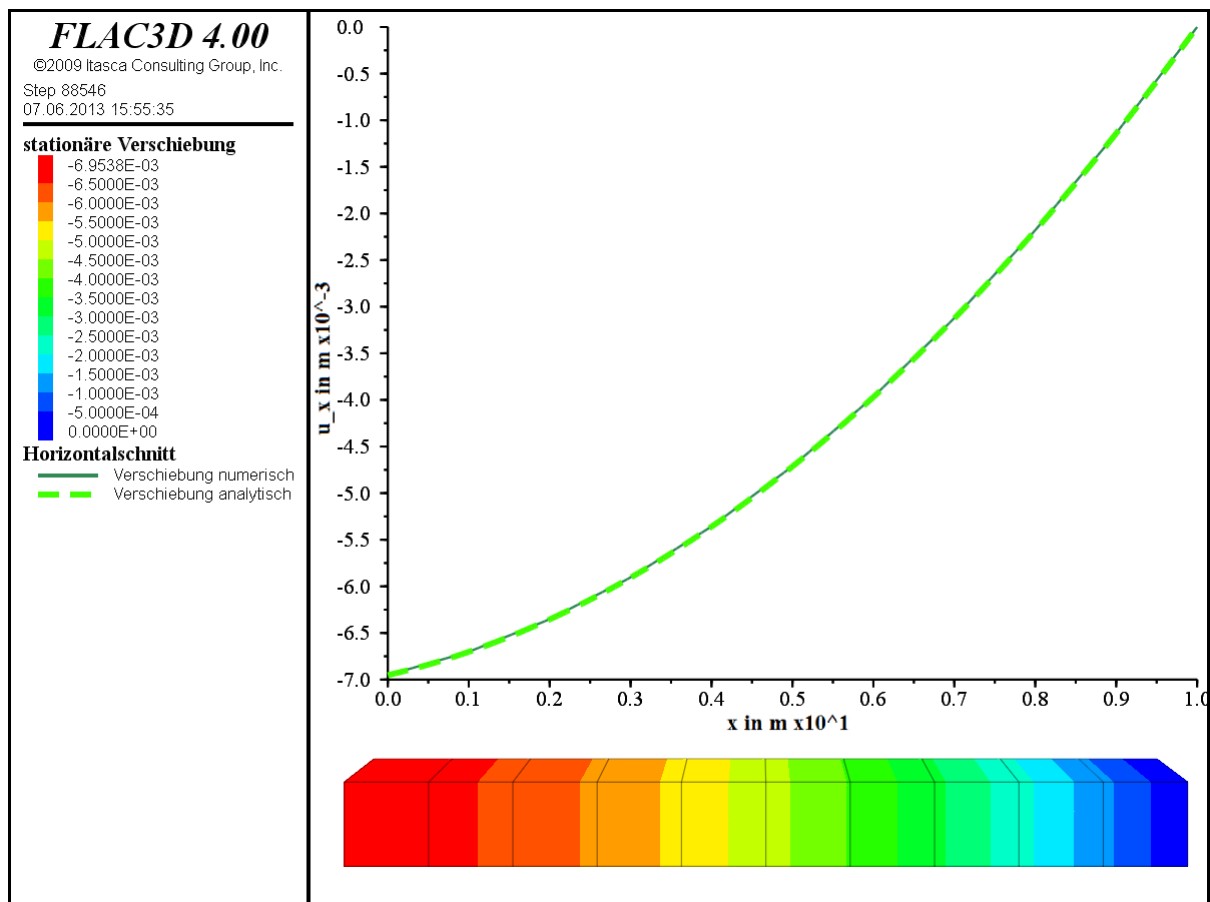


Bild 6.68: Berechnungsergebnisse zum Beispielmodell 2, HM-gekoppelte Berechnung – stationäre Verschiebungsverteilung

Insgesamt hat der FTK-Simulator dieses Modellbeispiel sehr gut wiedergegeben, wenngleich wie bereits erwähnt die Berechnungsdauer aufgrund der zu Berechnungsbeginn erforderlichen hohen Kopplungsfrequenz ein Manko darstellen kann.

6.4.2.4 Konsolidation einer Bodenschicht unter gleichförmiger Belastung

Zur Beschreibung eines flächenmäßig etwas ausgedehnteren (d.h. nicht punktuellen) Konsolidierungsprozesses in einer Bodenschicht unter räumlich gleichmäßiger Belastung kann ein in der Teufenrichtung eindimensionales Berechnungsmodell als grobe Näherung verwendet werden. Ein derartiges Modell ist in *Itasca (2009)* als Verifikationsbeispiel für $FLAC^{3D}$ herangezogen worden und wird hier unter geringfügigen Adaptionen hinsichtlich des Referenzgasdruckes und der verwendeten Verzerrung auf den FTK-Simulator übertragen. Das homogene und wassergesättigte Modell besteht aus 20 würfelförmigen Zonen, die sich von der Tagesoberfläche bis zu einem stabilen Grundwassernichtleiter in 20m Teufe erstrecken. Primär steht sowohl mechanisch wie auch hydraulisch keine spezielle Last an. Beim FTK-Simulator ist lediglich der Atmosphärendruck an der Modelloberseite als hydraulische Randbedingung mit $p_H = p_{atm} = 0,1013 MPa$ und als Auflast sowie für beide Prozesse als primärer Zahlenwert ($\sigma_p = p_p = p_{atm}$) aufzubringen. Am unteren, gebirgsseitigen Modellrand liegt erneut mechanische Unverschieblichkeit vor, während der Porenwasserdruck dort unter der *Neumann*-Randbedingung $p'_l(t; -20m) = 0 MPa/m$, mit der standardmäßig eine Zustromrate (von hier $0m/s$, d.h. Impermeabilität) modelliert wird, frei variieren kann. Zu Beginn der zeitlichen Simulation wird die mechanische Auflast um $0,1 MPa$ auf $\sigma_{obn} = 0,2013 MPa$ erhöht.

In diesem Modellbeispiel werden andere Zahlenwerte verwendet als in den vorangehenden beiden Beispielen – u.a. findet eine Kompaktion anstelle einer Expansion der Gebirgsmatrix statt. Dennoch ist dieses Beispiel dem zweiten Beispiel in seiner mathematischen Beschreibung wiederum ähnlich. Das mechanische Stoffmodell nach *Hooke* ist hier hingegen mit $\nu \neq 0$ unter einem linearen Verzerrungszustand angesetzt worden ($\varepsilon_x \equiv \varepsilon_y \equiv 0$), so dass sich nach Gleichung (5.57) ein linearer Verformungsmodul von $\tilde{E} = E(1-\nu)/(1+\nu)(1-2\nu)$ für die vertikale Spannungs-Verzerrungs-Beziehung ergibt. Für die erforderlichen Materialparameter werden die Zahlenwerte $E = 9.000/17 MPa$, $\nu = 11/34$ (nach Umrechnung aus Kompressi-



ons- und Schubmodul, $\Rightarrow \tilde{E} = 766,6667 \text{ MPa}$, $\alpha = 1$, $\tilde{M}_l = 4.000 \text{ MPa}$ und $k_l = 10^{-4} \text{ m}^2 / (\text{MPa} \cdot \text{s})$ verwendet.

Die Erhöhung der mechanischen Auflast führt grundsätzlich zur Setzung des Bodens und über die Erhöhung des Porendruckes zu einer zeitabhängigen Auspressung des Porenwassers an der Modelloberseite. Im stationären Zustand hat sich der Porendruck wieder auf den Atmosphärendruck abgebaut, wodurch zusätzliche Kompaktionen im Korngerüst und dadurch bedingt Setzungen entstanden sind. Mit den Gleichungen (5.58a/b), (5.59a/b) und (5.60a/b) mit $p_H = p_P$ werden das instantane Resultat, die zeitliche Entwicklung und der stationäre Zustand der physikalischen Größen wie folgt beschrieben, wobei in Gleichung (6.18d) die technische Verzerrung anstelle der logarithmischen Verzerrung zur Herleitung verwendet worden ist und ferner $c_i = \pi(i + 1/2)$ gilt:

$$p_l^{el}(Z) \equiv p_P + \frac{\alpha \tilde{M}_l}{\tilde{E} + \alpha^2 \tilde{M}_l} \Delta \sigma_{tot} \quad (6.18a)$$

$$u^{el}(Z) = \left(e^{-\frac{\Delta \sigma_{tot}}{\tilde{E} + \alpha^2 \tilde{M}_l}} - 1 \right) (Z + 20m) \quad (6.18b)$$

$$p_l(t; Z) \approx p_P + 2(p_l^{el} - p_P) \cdot \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{c_i} \sin\left(-Z \frac{c_i}{20m}\right) e^{-\left(\frac{c_i}{20m}\right)^2 \frac{k_l \tilde{E} \tilde{M}_l}{\tilde{E} + \alpha^2 \tilde{M}_l} t} \quad (6.18c)$$

$$u(t; Z) \approx \frac{\alpha(p_l^{el} - p_P) \cdot 20m}{\tilde{E}} \left(2 \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{c_i^2} \cos\left(Z \frac{c_i}{20m}\right) e^{-\left(\frac{c_i}{20m}\right)^2 \frac{k_l \tilde{E} \tilde{M}_l}{\tilde{E} + \alpha^2 \tilde{M}_l} t} \right) - \frac{\Delta \sigma_{tot}}{\tilde{E}} (Z + 20m) \quad (6.18d)$$

$$p_l(\infty; Z) \equiv p_P \quad (6.18e)$$

$$u(\infty; Z) = \left(e^{-\frac{\Delta \sigma_{tot}}{\tilde{E}}} - 1 \right) (Z + 20m) \quad (6.18f)$$

Die vorgegebenen Zahlenwerte liefern für den instantanen Porenwasserdruck sowie für die instantane Setzung $u^{el}(Z) = u(0s; Z)$ und die stationäre Gesamtsetzung an der Oberseite und in der Mitte des geometrischen Modells:

$$p_i^{el} = 0,18522 \text{ MPa}$$

$$u^{el}(0m) = -4,19576 \cdot 10^{-4} \text{ m}$$

$$u^{el}(-10m) = -2,0979 \cdot 10^{-4} \text{ m}$$

$$u(\infty; 0m) = -2,6085 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

$$u(\infty; -10m) = -1,3043 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

Ein Vergleich mit den Zahlenwerten, die bei einem Ansatz der technischen Verzerrungen auch für $u^{el}(Z)$ und $u(\infty; Z)$ erhalten worden wären, hat aufgrund der geringen auftretenden Deformationen einen vernachlässigbaren Unterschied in lediglich der letzten angegebenen Nachkommastelle der Zahlenwerte hervorgebracht.

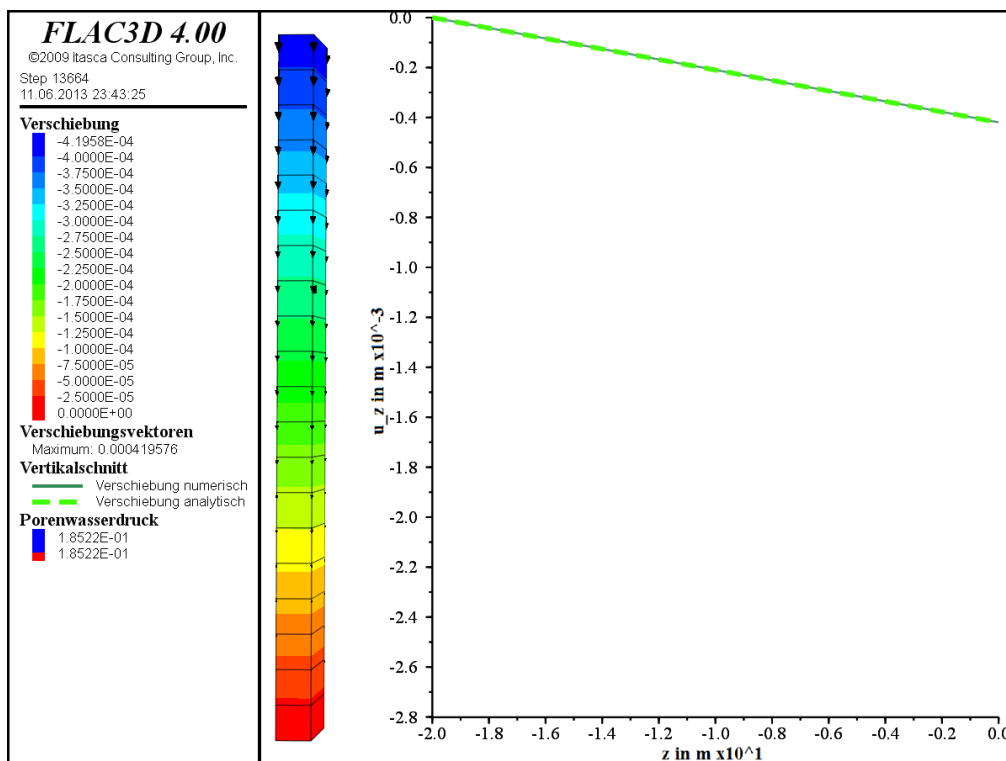


Bild 6.69: Berechnungsergebnisse zum Beispielmodell 3 – instantane Verschiebungsverteilung (Plots) sowie instantaner Zahlenwert für den Porenwasserdruck (Legende)

Bild 6.69 zufolge werden die instantanen Zahlenwerte für Porenwasserdruck und Verschiebungen erneut korrekt vom FTK-Simulator wiedergegeben.

Die zeitlichen Entwicklungen des Porendruckes und der Verschiebung in der Modellmitte sind in den Bildern 6.70 und 6.71 abgebildet, wobei sich die „Modellmitte“ für die zonal vorliegenden Porenwasserdrücke auf die zehnte Modellzone von oben bezieht. Die Berechnung

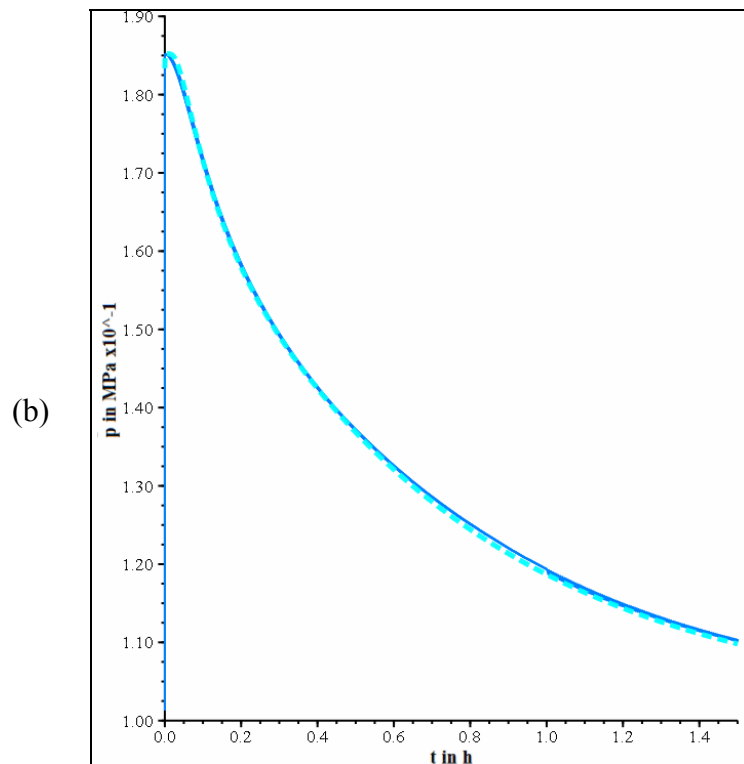
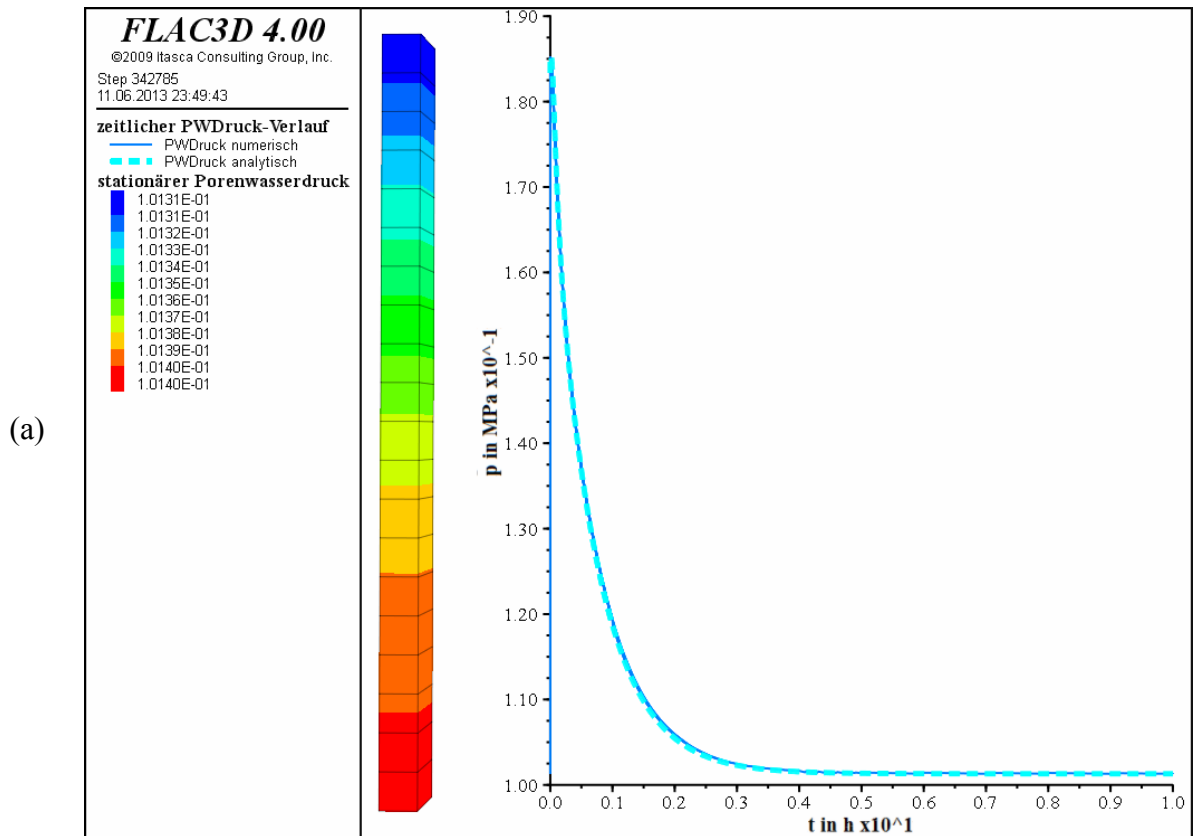


Bild 6.70: Berechnungsergebnisse zum Beispielmmodell 3 – Porenwasserdruckentwicklung in der Mitte des Modells (zehnte Modellzone von oben) im Verlauf (a) von 10 Stunden und (b) der ersten 1½ Stunden

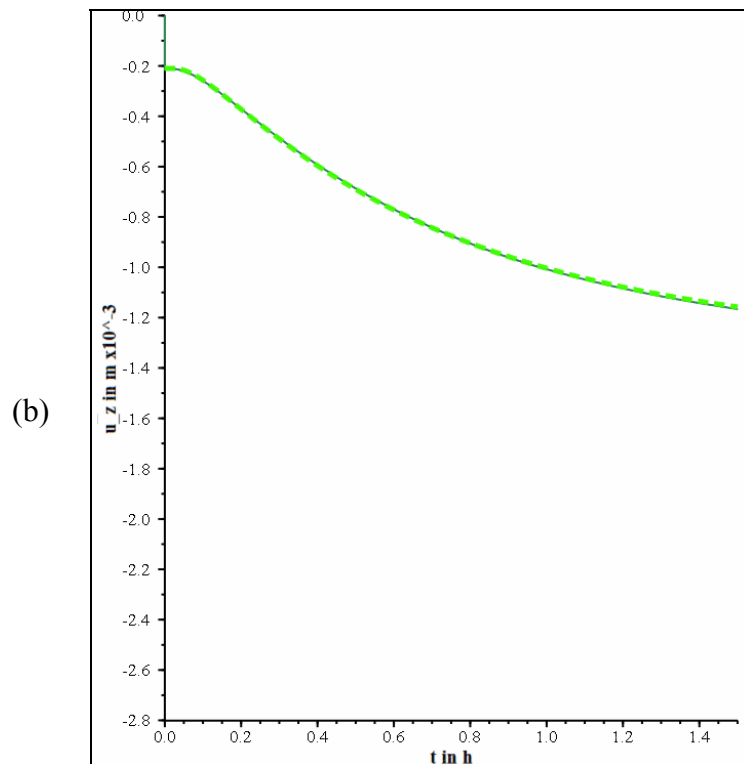
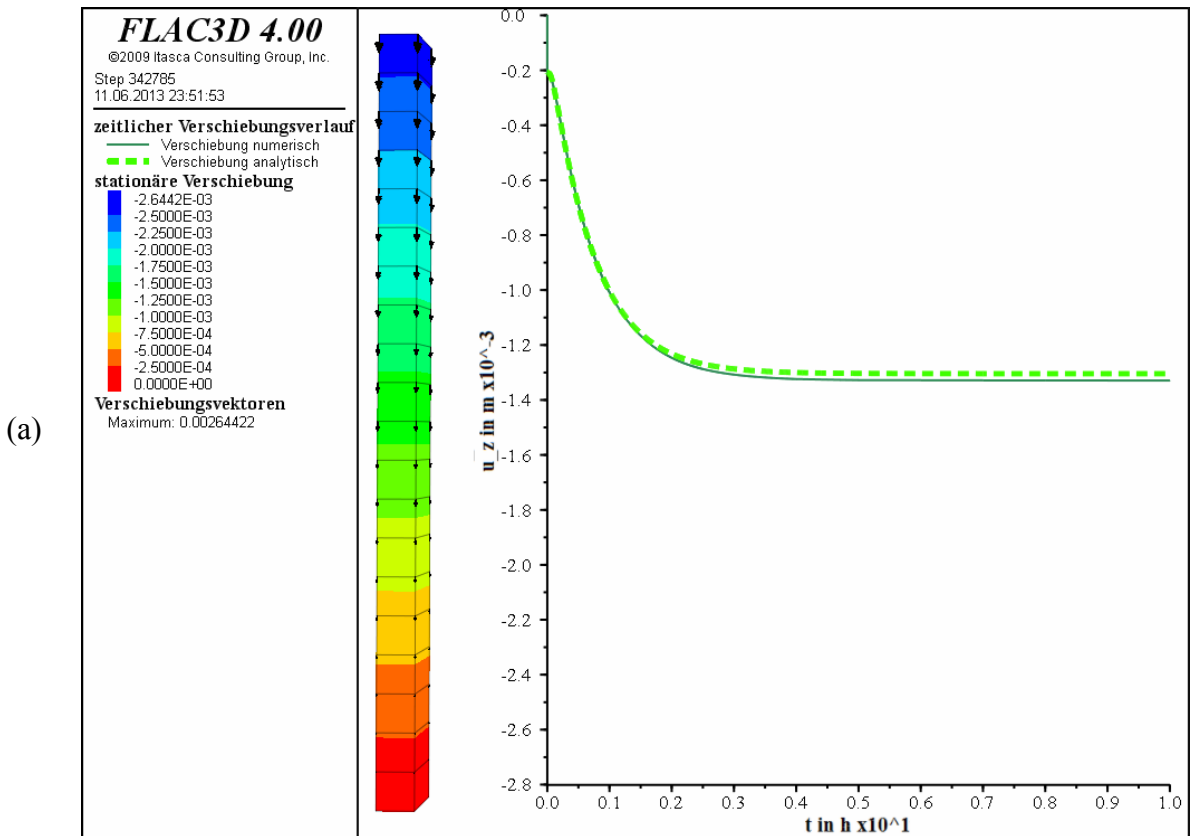


Bild 6.71: Berechnungsergebnisse zum Beispielmmodell 3 – Verschiebungsentwicklung in der Mitte des Modells im Verlauf (a) von 10 Stunden und (b) der ersten 1½ Stunden

ist dabei mit einem Zeitschritt von $dt = 0,001h$ begonnen worden, der u.a. bei $t = 1h$ auf $dt = 0,005h$ erhöht worden ist. In Bild 6.70(b) ist dieser Sprung im Berechnungszeitschritt zu erkennen: Wie in Abschnitt 6.4.2.3 hinsichtlich der HM-gekoppelten Simulation bereits beschrieben worden ist, führt beim Porendruckgraphen der erhöhte Zeitschritt aufgrund der entgegengesetzt wirkenden Effekte von Strömungsprozess und Kompaktion zu stärkeren Oszillationen, welche durch die in diesem Modellbeispiel sehr hoch angesetzte Permeabilität noch verstärkt wird. Mit der verwendeten Kopplungsfrequenz ist es dennoch wiederum gelungen, eine sehr gute rechnerische Approximation des analytischen Porendruckverlaufs zu erlangen.

Mit Blick auf die Verschiebungen in Bild 6.71 fällt hingegen auf, dass sich nach einer sehr guten Anfangsphase im Verlauf der Berechnung Rundungsfehler akkumulieren, die zu einer Abweichung beim stationären Zahlenwert von 1,4% führen. Diese geringfügigen (und daher tragbaren) Diskrepanzen in den Verschiebungen konnten zwar, wie Vergleichsberechnungen gezeigt haben, durch eine sehr starke Vergrößerung der Zeitschritte minimiert werden, allerdings sind dabei erwartungsgemäß die zeitlichen Entwicklungen der Porendrücke und der Verschiebungen signifikant verfälscht worden. Es sind also idealerweise – schon aus Effizienzgründen hinsichtlich der Simulationsdauer – nicht zu feine Berechnungszeitschritte zu verwenden, sondern nur solche hinreichend feinen Zeitschritte, dass die zeitabhängige Entwicklung der hydromechanischen Größen des Modells ausreichend oszillationsfrei abläuft.

Bild 6.72 zeigt schließlich die Plots und Zahlenwerte zum stationären Zustand, die die schlussendlich erhaltenen akkumulierten Rundungsfehler nochmals verdeutlichen. Der Porenwasserdruck ist (noch?) nicht exakt beim Zielwert von $p_l(\infty; Z) \equiv p_{am}$ angelangt, und die Abweichung in der Verschiebung ist linear und damit regelmäßig. Neben dem dunkelgrünen Graphen ist darüber hinaus ein roter Graph für die stationäre Verschiebung in das Diagramm von Bild 6.72 eingezeichnet, der durch eine der oben erwähnten Vergleichsberechnungen erhalten worden ist und die analytische Lösung deutlich besser approximiert.

Auch bezüglich dieses dritten Modellbeispiels kann dem FTK-Simulator also eine äußerst zufriedenstellende Funktionsweise attestiert werden. Zusammenfassend für diese drei einfachen Modellbeispiele hat der FTK-Simulator also gute bis sehr gute Ergebnisse hervorgebracht und kann somit für Einphasenflussprozesse als im Grundsatz funktionstüchtig betrachtet werden. Inwieweit sich bei komplexeren Modellgeometrien Verfahrensfehler ergeben (Fehler, die durch den Einsatz eines numerischen Lösungsverfahrens entstehen) und Rundungsfehler aufsummieren können, wird im folgenden Abschnitt 6.4.3 untersucht. Für weiter-



führende Simulationen ist dabei mit Blick auf die Simulationsdauer auch immer abzuwägen, wie fein die Zeitschritte in den unterschiedlichen Stufen des modellierten hydromechanischen Prozesses gewählt werden können und sollten.

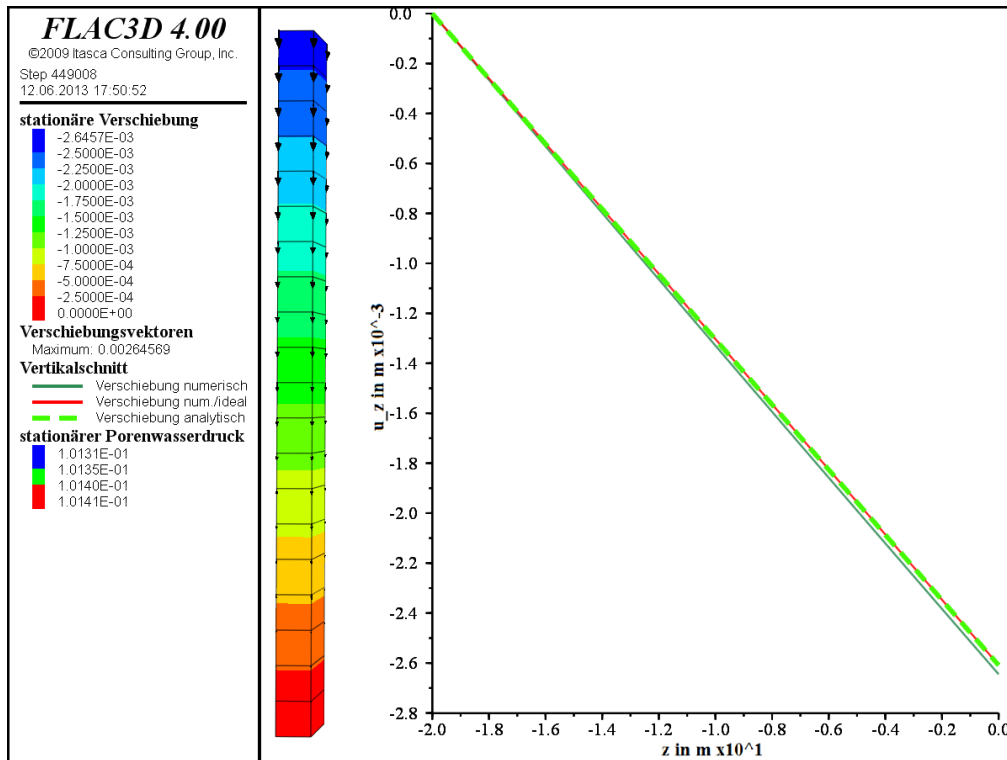


Bild 6.72: Berechnungsergebnisse zum Beispielmodell 3 – stationäre Verschiebungsverteilungen für unterschiedliche Zeitschrittsteuerungen (Plots) sowie stationäre Zahlenwerte für den Porenwasserdruck (Legende)



6.4.3 Verifizierung anhand von Vergleichsberechnungen mit FLAC^{3D} – HM-gekoppelte Simulationen des Tragverhaltens eines Bohrlochs im hydraulisch-mechanischen Nahfeld einer Strecke

6.4.3.1 Systematik der Vorgehensweise

Die im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten numerischen Modellierungs- und Simulationsarbeiten sollen zum Erreichen von zwei übergeordneten Zielen beitragen. Das erste Ziel besteht darin, den am LfD&G entwickelten FTK-Simulator zu validieren. Die Validation erfolgt anhand eines Vergleiches von FTK-Ergebnissen mit Ergebnissen, die unter Verwendung des Simulators FLAC^{3D} ermittelt worden sind. Mit diesem Simulator können bei Beschränkung auf den Einphasenfluss sowohl mechanische wie hydraulische und auch mechanisch-hydraulisch gekoppelte Simulationen zum Verhalten von porösen Gebirgsformationen (z.B. Opalinuston oder Toarcium-Tongestein) unter Annahme eines zu jedem Zeitpunkt vollständig wassergesättigten Porenraumes (Einphasenfluss) durchgeführt werden. Darüber hinaus sollen die Simulatoren FLAC^{3D} und FTK auch bezüglich ihrer numerischen Leistungsfähigkeit im Vergleich zueinander untersucht werden (Rechenzeiten, Genauigkeit der Ergebnisse).

Die auf der ersten aufbauende zweite Zielsetzung für die im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten numerischen Modellierungs- und Simulationsarbeiten ist die Erarbeitung der Grundlagen zur hydraulisch-mechanisch gekoppelten (Re-)Analyse des Trag- und Deformationsverhaltens von Bohrlöchern in Tongesteinsformationen, die im Rahmen dieses Vorhabens hinsichtlich ihres Tragverhaltens in situ untersucht worden sind. Da die Bohrlöcher von Strecken ausgehend geteuft und auch vermessen worden sind, soll dabei insbesondere auch die Möglichkeit, den Einfluss eines hydraulisch-mechanischen Streckennahfeldes auf das Trag- und Deformationsverhalten der Bohrlöcher in den Simulationen berücksichtigen zu können, geschaffen werden.

Um das zweite der vorstehend formulierten Ziele erreichen zu können, sind die in diesem Abschnitt 6.4.3 vorgestellten numerischen Untersuchungen zur Erprobung und Validierung des FTK-Simulators nicht an elementaren, die geotechnische Realität meist stark abstrahierenden Modellen wie beispielsweise Eielementmodellen oder einfachen Stabmodellen, die in starker Abstraktion einem Dammbauwerk entsprechen, erfolgt, sondern an aus geomechanisch-ingenieurtechnischer Sicht praxisnahen quasi-zweidimensionalen und dreidimensionalen Bohrloch- und Streckenmodellen.

Anmerkung: Die Verwendung des Begriffes quasi-zweidimensional erfolgt im Rahmen dieses Vorhabens für die scheibenartigen Berechnungsmodelle, die entweder in ihrer dritten Dimension diskretisierungsbezogen nur eine Elementreihe aufweisen oder bei denen der Ausbruch des zu analysierenden untertägigen Hohlraums in einem Abschlag erfolgt, wobei sich der betrachtete Hohlraum über die gesamte Modelltiefe erstreckt, sodass bei der numerischen Analyse unter Verwendung dieser Modelle eine Berücksichtigung des Lastabtrags durch das vor der Ortsbrust anstehende Gebirge nicht erfolgt.

Ein entscheidender motivierender Aspekt zur Entwicklung des FTK-Simulators ist die für Prognosen zur Langzeitsicherheit von nuklearen Endlagern als zwingend notwendig identifizierte Berücksichtigung eines Zweiphasenflusses bzw. eines Mehrphasenflusses bei der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Analyse gewesen. Dementsprechend ist bei der Entwicklung des FTK-Simulators auch die Option integriert worden, numerische Untersuchungen zum hydraulisch-mechanisch gekoppelten Trag- und Deformationsverhalten von untertägigen

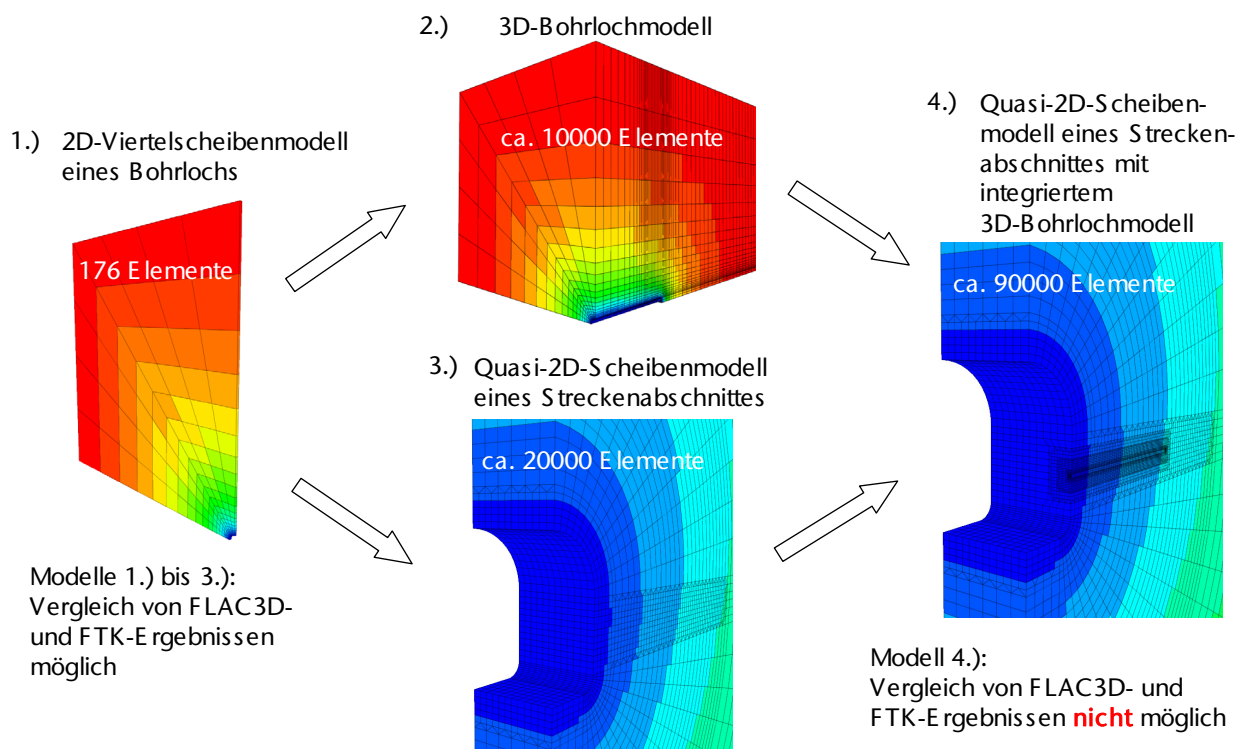


Bild 6.73: Überblick über die verwendeten Modelle und die Systematik der Vorgehensweise bei der Entwicklung eines Modells zur Simulation des dreidimensionalen Trag- und Deformationsverhaltens eines Bohrlochs im Nahfeld eines Streckenabschnittes mit dem FTK-Simulator

Hohlräumen in porösen Gesteinsformationen unter der Annahme der Ausbildung einer Teilsättigung des Porenraumes mit Wasser bei gleichzeitigem Eindringen von Luft oder anderen Gasen in den Porenraum des Tongesteins (Zweiphasenfluss bzw. Mehrphasenfluss) durchzuführen. Die im vorliegenden Abschnitt beschriebenen numerischen Arbeiten dienen jedoch zunächst ausschließlich der Validierung des FTK-Simulators bezüglich der numerischen Simulation des Einphasenflusses.

Am LfD&G generierte Simulationsergebnisse zum hydraulisch-mechanisch gekoppelten Bohrlochtrag- und -deformationsverhalten unter Berücksichtigung eines Zwei- oder Mehrphasenflusses können Abschnitt 7 des vorliegenden Berichts entnommen werden.

Zur Durchführung der numerischen Simulationen zur hydraulisch-mechanisch gekoppelten Analyse des Trag- und Deformationsverhalten von untertägigen Hohlräumen in Tongesteinsformationen sind im Rahmen der Entstehung des vorliegenden Berichts vier unterschiedliche Berechnungsmodelle entwickelt und diskretisiert worden. Einen Überblick über die im Rahmen der numerischen Untersuchungen eingesetzten Gebirgsmodelle und eine skizzenhafte Darlegung der dem vorliegenden Bericht zugrunde liegenden stufenweisen Systematik in der Vorgehensweise zur finalen Entwicklung eines Gebirgsmodells zur dreidimensionalen Simulation des Bohrlochtrag- und Bohrlochdeformationsverhaltens im Nahfeld eines Streckenabschnittes kann Bild 6.73 entnommen werden. Dabei handelt es sich um folgende Schritte:

- (1) zweidimensionales Bohrlochmodell (Endzustand),
- (2) dreidimensionales Bohrlochmodell (Auffahrung, Endzustand),
- (3) dreidimensionales Streckenmodell (Endzustand),
- (4) dreidimensionales Streckenmodell mit integriertem Bohrloch (Endzustand Strecke, Bohrlochauffahrung und Endzustand Bohrloch).

Die ersten drei der vier in der nachfolgenden Übersicht über die durchgeführten numerischen Arbeiten vorgestellten Modelle sind in Bild 6.73 unter Abbildungen 1.) bis 3.) dargestellt. Die numerischen Simulationen unter Verwendung dieser drei Modelle haben dazu gedient, die Erfahrungen und den Kenntnisstand bezüglich der Durchführung von Berechnungen mittels des FTK-Simulators auf realitätsnahe Modelle zu erweitern, die Leistungsfähigkeit des FTK-Simulators im Bereich des Einphasenflusses insbesondere im Vergleich zum Simulator FLAC^{3D} zu ermitteln und darüber hinaus die Korrektheit der vom FTK-Simulator generierten Ergebnisse zu überprüfen. Die Überprüfung der mit dem FTK-Simulator erhaltenen Ergebnis-

se ist durch einen Vergleich mit Ergebnissen, die mit den identischen Modellen mit dem als etabliert anzusehenden kommerziellen Simulator FLAC^{3D} generiert worden sind, erfolgt. Um einen Vergleich der Ergebnisse, die der FTK-Simulator und die der Simulator FLAC^{3D} liefern, durchführen zu können, sind die Berechnungen an den ersten drei zum Einsatz gekommenen Modellen sowohl mit dem Simulator FLAC^{3D} wie auch mit dem neu entwickelten FTK-Simulator durchgeführt worden.

Das vierte und in Bild 6.73 unter Abbildung 4.) dargestellte Modell ist schließlich aufgrund seiner großen Zonenanzahl sowie aufgrund der Komplexität seiner Diskretisierung mit auch extremen Unterschieden zwischen den räumlichen Dimensionen einiger Zonen nicht für Berechnungen zum hydraulisch-mechanisch gekoppelten Gebirgsverhalten mit dem Simulator FLAC^{3D} geeignet. Daher sind mit dem vierten vorgestellten Modell ausschließlich Berechnungen mittels des FTK-Simulators erfolgt; daher können die numerischen Berechnungen mit dem vierten der eingesetzten Modelle auch nicht zur Validierung des FTK-Simulators beitragen. Es hat sich gezeigt, dass mit der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen an einem derartig großen und in seinem Aufbau derart komplexen Modell mit zu simulierenden Zeiträumen von $\Delta t > 10$ a ein Maß an Anforderungen an das Simulationssystem erreicht worden ist, das vom Simulator FLAC^{3D} nicht mehr erfüllt werden konnte. Bevor nachfolgend eine intensivere Befassung mit den Grenzen der Leistungsfähigkeit des Simulators FLAC^{3D} in Bezug auf komplexe Modellgeometrien bei hydromechanisch gekoppelten Prozessen erfolgt, soll nachfolgend zunächst ein Überblick über die zur Anwendung gekommenen Modelle und ihre Systemgeometrien gegeben werden.

Zu Beginn der numerischen Untersuchungen ist das in Bild 6.73 unter Abbildung 1.) in Bohrlochlängsrichtung nur durch eine Zone diskretisierte und somit quasi-zweidimensionale **Viertelscheibenmodell eines Bohrlochs** analysiert worden. Eine weitere Darstellung des aus insgesamt 176 Zonen bestehenden Viertelscheibenmodells zur Simulation des HM-Tragverhaltens eines Bohrlochs kann Bild 6.74 entnommen werden.

Die numerischen Untersuchungen mit dem quasi-zweidimensionalen Viertelscheibenmodell dienen zum einen zunächst dazu, Erfahrungen im Umgang mit dem neu entwickelten FTK-Simulator zu sammeln. Zum anderen wird anhand der mittels des FTK-Simulators und mit dem Simulator FLAC^{3D} für das Viertelscheibenmodell generierten Berechnungsergebnisse ein erster Vergleich zwischen den wichtigsten mit den beiden Simulatoren ermittelten Zustandsgrößen ermöglicht.

Der Radius des modellierten Bohrlochs beträgt in Anlehnung an die im URL Mont Terri untersuchten Observationsbohrlöcher $r_{BL} = 0,0505$ m. Um neben der realitätsnahen Simulation des Tragverhaltens des mechanischen Bohrlochnahfeldes mit dem aus dem Hohlraumausbruch resultierenden Sekundärspannungsfeld auch eine möglichst realitätsnahe Simulation der Strömungsprozesse im hydraulischen Nahfeld des Bohrlochs erreichen zu können, ist mit Modellabmessungen von $h = 2,5$ m und $b = 2,5$ m eine räumliche Ausdehnung des Modells vorgenommen worden, bei der die Außenabmessungen lateral zur Bohrlochlängsachse min-

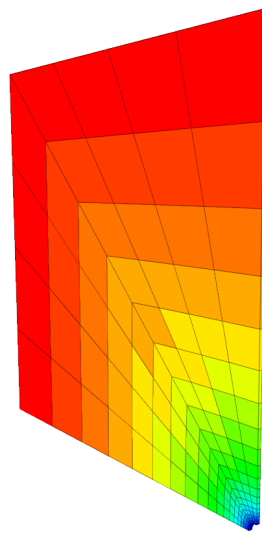


Bild 6.74: Quasi-zweidimensionales Viertelscheibenmodell mit 176 Zonen zur Simulation des Trag- und Deformationsverhaltens eines Bohrlochs

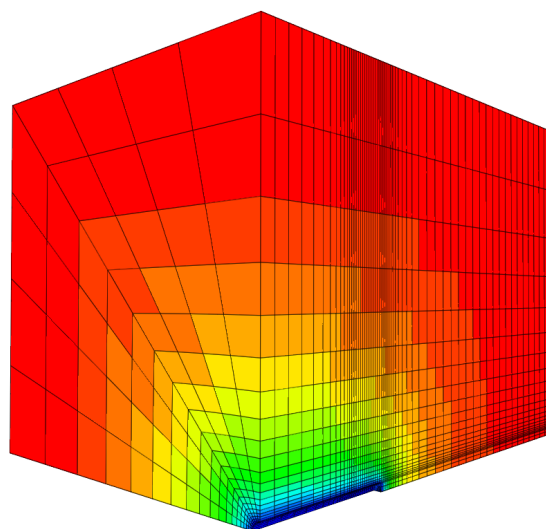


Bild 6.75: Dreidimensionales Viertelmodell eines Bohrlochs mit einer Zonenanzahl von $n_z \approx 10.000$ Zonen

destens in etwa dem 50-fachen des Radius des modellierten Hohlraums entsprechen. Die Dicke des quasi-zweidimensionalen Modells in Richtung der Bohrlochlängsachse beträgt lediglich $l = 0,02$ m.

Im Anschluss an die Untersuchungen mit dem quasi-zweidimensionalen Viertelscheibenmodell sind vergleichende Untersuchungen zwischen dem FTK-Simulator und dem Simulator FLAC^{3D} anhand eines *dreidimensionalen Bohrlochmodells* mit einer ungefähren Elementanzahl von $n_E \approx 10000$ Elementen durchgeführt worden. Als Basis für die Erstellung des in Bild 6.75 dargestellten dreidimensionalen Bohrlochmodells ist das vorangehend beschriebene quasi-zweidimensionale Bohrlochmodell herangezogen worden.

Wie aus einer vergleichenden Betrachtung von Bild 6.74 und Bild 6.75 ersehen werden kann, weist das dreidimensionale Modell in der Ebene normal zur Bohrlochlängsachse die gleiche Diskretisierung und die identische Dimensionierung wie das quasi-zweidimensionale Modell auf. Zur Generierung des dreidimensionalen Bohrlochmodells ist das quasi-zweidimensionale Modell mit einer Länge von $l = 0,02$ m auf eine Länge von $l = 3,5$ m in Richtung der Bohrlochlängsachse erweitert worden und darüber hinaus in Bohrlochlängsrichtung 60-fach unterteilt worden. Die Unterteilung in Bohrlochlängsrichtung ist dabei nicht gleichmäßig vorgenommen worden, sondern an den Modellrändern mit Zonenlängen in Bohrlochlängsrichtung von $l = 0,1$ m tendenziell eher grob erfolgt, während im Bereich des Bohrlochtiefsten sowie einige Dezimeter davor und dahinter mit Zonenlängen von $l = 0,02$ m eine deutlich feinere Diskretisierung in Bohrlochlängsrichtung gewählt worden ist. Dadurch gelingt es in diesem Modellbereich dreidimensionale Vortriebseffekte hinreichend genau numerisch abbilden zu können. Somit entspricht eine Zone dicke Scheibe mit der feinsten Diskretisierung in Bohrlochlängsrichtung aus dem dreidimensionalen Modell bezüglich ihrer Diskretisierung und Geometrie genau der Diskretisierung und Geometrie des quasi-zweidimensionalen Viertelscheibenmodells.

Aufgrund des sehr ähnlichen Aufbaus des dreidimensionalen und des quasi-zweidimensionalen Bohrlochmodells lassen sich einige Erkenntnisse, die nachfolgend in Abschnitt 6.4.3.5 noch ausführlich erläutert werden, aus den numerischen Berechnungen mit dem quasi-zweidimensionalen Bohrlochmodell unmittelbar auf die Berechnungen mit dem dreidimensionalen Bohrlochmodell übertragen. Durch die numerischen Simulationen mit dem dreidimensionalen Bohrlochmodell ist nunmehr nach dem Vergleich der Ergebnisse mit dem nur quasi-zweidimensionalen Viertelscheibenmodell auch ein Vergleich zwischen den Ergebnissen, die



mit dem Simulator FLAC^{3D} und mit dem FTK-Simulator generiert worden sind, auch für den ungleich komplexeren Fall des räumlich-zeitlichen Abteufens eines Bohrlochs, das einer kleinmaßstäblichen Tunnelvortriebssimulation entspricht, möglich.

Das dreidimensionalen Bohrlochmodell weist eine Länge von $l = 3,0$ m, eine Breite von $b = 2,5$ m und eine Höhe von $h = 2,5$ m auf. Aufgrund der Diskretisierung mit $n_z \approx 10.000$ Zonen liegt im Vergleich zu der Anzahl der Zonen der später vorgestellten Modelle eine noch verhältnismäßig geringe Zonenanzahl vor, sodass für das dreidimensionale Bohrlochmodell ein Vergleich der Berechnungsergebnisse der beiden Simulatoren FLAC^{3D} und FTK möglich ist. Auf die Auswirkungen von Modellgröße und Modelldiskretisierung im Hinblick auf die für die Berechnungen benötigten Echtzeiten bei Verwendung der Simulatoren FLAC^{3D} und FTK wird nachfolgend in Abschnitt 6.4.3.4 noch ausführlich eingegangen. Im Kontext der Erläuterung der benötigten Rechenzeiten wird in Abschnitt 6.4.3.4 insbesondere auch erklärt, weshalb für das kombinierte dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell eine Gegenüberstellung von Berechnungsergebnissen der Simulatoren FLAC^{3D} und FTK aufgrund eines zu hohen zeitlichen Berechnungsaufwandes nicht möglich gewesen ist. Da für das kombinierte dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell ein Vergleich der Berechnungsergebnisse des FTK-Simulators mit den Berechnungsergebnissen des Simulators FLAC^{3D} nicht vorgenommen werden konnte, sind im Rahmen dieses Vorhabens die unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrlochmodells generierten Berechnungsergebnisse die einzige Grundlage für einen Vergleich von Ergebnissen des Simulators FLAC^{3D} und des FTK-Simulators für die räumlich-zeitliche Simulation des Abteufens eines Bohrlochs.

Bei dem dritten zum Einsatz gekommenen Modell handelt es sich um das *quasi-zweidimensionale Modell eines Streckenabschnittes*. Ein Ausschnitt des Modells kann aus Bild 6.76 ersehen werden.

Mit einer Anzahl von $n_z \approx 20.000$ Zonen und einer nicht kreisrunden Hohlraumkontur weist das dritte der zum Einsatz gekommenen Berechnungsmodelle eine deutlich komplexere Diskretisierung auf als die vorangehend vorgestellten ersten beiden Modelle. Mit einer Ausdehnung von $l = 3$ m in Streckenlängsrichtung ist das Streckenmodell im Verhältnis zu den Abmessungen der modellierten Strecke, deren Höhe $h = 4,9$ m und deren Breite $b = 4$ m beträgt, bei der geometrischen Modellierung eher schmal gehalten worden. Die äußeren Abmessungen des Berechnungsausschnittes sind zu $h = 200$ m und $b = 100$ m festgelegt worden. Eine drei-

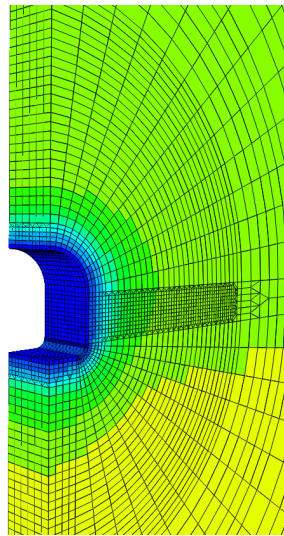


Bild 6.76: Ausschnitt aus dem quasi-zweidimensionalen Modell eines Streckenabschnittes mit einer Anzahl von $n_z \approx 20.000$ Zonen und einer sehr feinen Diskretisierung des Gebirges im Stoßbereich bis in eine Konturtiefe von ca. 10 m (in diesen Bereich hinein wird in einem nachfolgenden Berechnungsmodell ein Bohrloch implementiert)

dimensionale Simulation des Trag- und Deformationsverhaltens des die Strecke umgebenden Gebirges inklusive eines dann zu berücksichtigenden Lastabtrags durch das vor der Ortsbrust anstehende Gebirge während der Simulation des Vortriebs hätte die Modellierung eines deutlich größeren Gebirgsbereiches in Streckenlängsrichtung vorausgesetzt. Allerdings wäre für ein derartiges, dann tatsächlich dreidimensionales Streckenmodell inklusive einer vorbereiteten zonalen Diskretisierung, die derart fein ausgelegt ist, dass im Anschluss zum Aufbau des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells die Diskretisierung für das lateral abzuteufende Bohrloch integriert werden kann, die Zonenanzahl des Berechnungsmodells deutlich zu groß geworden, um dann auch mit diesem Berechnungsmodell (noch ohne explizites Bohrloch) die HM-gekoppelten Berechnungen mit dem Simulator $\text{FLAC}^{3\text{D}}$ innerhalb von überschaubaren Zeiträumen durchführen zu können.

Für die numerischen Berechnungen im Rahmen dieses Vorhabens hat die Höchstgrenze für die Durchführung einer einzelnen Berechnung mit dem Streckenmodell nach Bild 6.76 bei $t_B \approx 12$ Wochen gelegen. Dabei ist mit dem Simulator $\text{FLAC}^{3\text{D}}$ nach instantanem Ausbruch eine Einphasenströmung bei vollständiger hydraulisch-mechanischer Kopplung über einen Zeitraum von $t_h \approx 11$ Jahren simuliert worden. Da die dreidimensionale Simulation des Streckenvortriebs ein Vielfaches der hier zur Diskretisierung verwendeten Zonen erforderlich gemacht hätte, hätte dann zwangsläufig auch eine Vervielfachung der ohnehin hier schon be-



nötigten erheblichen Berechnungszeit resultiert. Daher ist die Simulation des Ausbruchs der Strecke in einem einzigen Schritt erfolgt, sodass das in Bild 6.76 bzw. in Bild 6.73 unter Abbildung 3.) aufgezeigte Streckenmodell als quasi-zweidimensional zu bezeichnen ist. Die Diskretisierung in der Umgebung der Strecke ist dennoch mit einer Unterteilung des Modells auch in Streckenlängsrichtung in bis zu $n_y = 12$ Zonen erfolgt, um im nachfolgenden Schritt die Erweiterung dieses Streckenmodells zu dem kombinierten Bohrloch-Streckenmodell zu ermöglichen. Bild 6.76 kann entnommen werden, dass eine ohnehin schon im Verhältnis zur Streckengröße sehr feine Modelldiskretisierung im First- und Sohlbereich der Strecke durch eine noch erheblich feinere, vom Stoßbereich der Strecke aus ca. 10 m weit horizontal in das Gebirge hineinreichende Diskretisierung ergänzt wird. In den in diesem Bereich besonders fein diskretisierten Stoßbereich hinein ist im Anschluss an die Berechnungen mit dem quasi-zweidimensionalen Streckenabschnittsmodell zur Erstellung des kombinierten dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells die nochmals gegenüber der in Bild 6.76 zu erkennenden Diskretisierung erheblich verfeinerte Bohrlochdiskretisierung eingefügt worden, um die räumlich-zeitliche Simulation des Bohrlochabteufens zu ermöglichen.

Nach den Ergebnisvergleichen für das quasi-zweidimensionale und das dreidimensionale Bohrlochmodell hat auch der in Abschnitt 6.4.3.7 detailliert beschriebene Vergleich der mit den Simulatoren $FLAC^{3D}$ und FTK generierten Berechnungsergebnisse für das Streckenmodell zu zufriedenstellenden Ergebnissen geführt. Da nunmehr durch einen umfangreichen Ergebnisvergleich mit dem als etabliert angesehenen, kommerziellen Simulator $FLAC^{3D}$ von einer erfolgreichen Validierung des FTK-Simulators für den Bereich der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Analyse des Gebirgstragverhaltens unter Annahme eines Einphasenflusses ausgegangen werden kann, sind anschließend die Berechnungen mit dem ***dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodell*** mittels des FTK-Simulators vorgenommen worden.

Ein Teilbereich des schließlich für die Simulation des dreidimensionalen Bohrlochvortriebs im hydraulisch-mechanischen Nahfeld eines Streckenabschnitts entwickelten dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells für Schritt 4 kann aus Bild 6.77 ersehen werden.

Der Teilbereich des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells, der in Bild 6.77 dargestellt ist, zeigt das Gebirge im näheren Umfeld des bereits ausgebrochenen Streckenabschnitts mit der gemessen an den Gesamtabmessungen des Modells sehr filigranen Diskretisierung des Bohrlochnahbereichs des $l_{BL} = 6$ m langen und in der Darstellung in Bild 6.77 noch nicht ab-

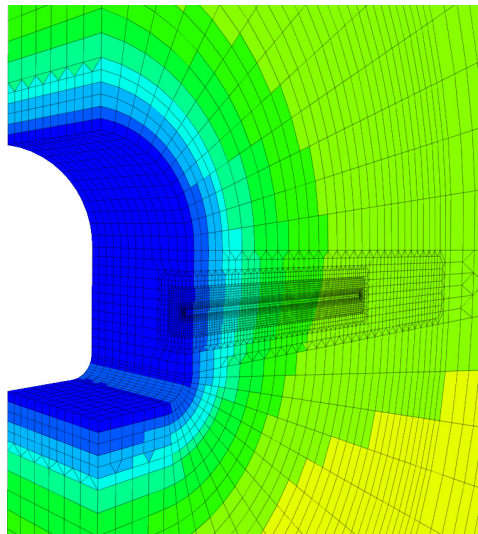


Bild 6.77: Teilbereich des Bohrloch-Streckenmodells zur dreidimensionalen Simulation des Bohrlochabteufens im hydraulisch-mechanischen Nahfeld eines Streckenabschnitts mit bereits ausgebrochenem Streckenabschnitt und Diskretisierung des horizontal verlaufenden Bohrlochs im Stoßbereich der Strecke

geteufte Bohrlochs. Mit diesem Berechnungsmodell soll die dreidimensionale Simulation des Abteufens eines Bohrlochs aus dem Streckennahfeld in das Streckenfernfeld mit der Ermittlung des sekundären Spannungs- und Strömungsfeldes in das Streckenfernfeld erfolgen. In dem Streckenfernfeld liegt noch näherungsweise der primäre mechanische und hydraulische Gebirgszustand vor. In Bezug auf seine äußeren Abmessungen sowie in Bezug auf die Streckengeometrie ist das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell genau identisch mit dem quasi-zweidimensionalen Streckenmodell aus Schritt 3. Das modellierte Bohrloch hat eine Länge von $l_B = 6$ m. Der Radius des Bohrlochs beträgt wie schon für die vorangehend vorgestellten zwei Bohrlochmodelle in Anlehnung an die in situ im URL Mont Terri untersuchten Observationsbohrlöcher $r_{BL} = 0,0505$ m ($d=0,11$ m).

Das modellierte Bohrloch ist im Rahmen der Durchführung der numerischen Simulationen und im Anschluss im Zuge der Auswertung der Berechnungsergebnisse nicht ausschließlich als eine das Tragverhalten des Gesamttragssystem beeinflussende Systemkomponente betrachtet worden, sondern darüber hinaus insbesondere als der Teil des untertägigen Tragsystems, der in seinem hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten vordringlich zu simulieren und zu analysieren ist. Aus der Betrachtung des Bohrlochs als dem vordringlich zu analysierenden Teil des Tragsystems ist das Erfordernis einer deutlich feineren Diskretisierung des Gebirges in der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochs hervorgegangen als sie für den Fall notwendig gewesen wäre, dass das Bohrloch ausschließlich als eine das hydraulisch-mechanisch gekop-



pelte Verhalten der Strecke beeinflussende Systemkomponente zu betrachten gewesen wäre. Die besondere Herausforderung bei der Modellierung des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells besteht somit darin, das Gebirge in der Umgebung des Bohrlochs hinreichend fein zu diskretisieren, um anhand der Auswertung der Simulationsergebnisse neben Aussagen zum Streckentragverhalten und zum hydraulischen Verhalten der Strecke insbesondere auch Aussagen zum Trag- und Deformationsverhalten und zum hydraulischen Verhalten des Gebirges im hydraulisch-mechanischen Nahfeld des Bohrlochs und dabei speziell an der Kontur des Bohrlochs treffen zu können und zwar sowohl im Nahfeld der Strecke wie auch in ihrem Fernfeld.

Durch den im Vorfeld der Modellerstellung formulierten Anspruch, das Bohrlochtragverhalten detailliert abbilden zu können und bei der Analyse der Berechnungsergebnisse im Nachlauf auch in Bezug auf jede mechanisch-hydraulisch relevante Zustandsgröße eine aus geomechanischer Sicht aussagekräftige Auswertung vornehmen zu können, haben sich für die Feinheit der Modelldiskretisierung Mindestansprüche ergeben, die dazu geführt haben, dass die Diskretisierung des Berechnungsmodells zur Simulation eines Bohrlochabteufens über eine Länge von $l_B = 6$ m die Verwendung einer Gesamtanzahl von $n_Z \approx 90.000$ Zonen erfordert hat. Ein Vergleich der Zonenanzahlen des in Bild 6.76 dargestellten Streckenmodells mit $n_Z \approx 20.000$ Zonen und des in Bild 6.77 zu betrachtenden kombinierten Bohrloch-Streckenmodells mit $n_Z \approx 90.000$ Zonen verdeutlicht, dass für die hinreichend feine Diskretisierung des Bohrlochs und des Gebirges in seiner unmittelbaren Umgebung zusätzlich $\Delta n_Z \approx 70.000$ Zonen in das Modell integriert werden mussten.

Bereits diese Differenz in der Anzahl der zur Diskretisierung notwendigen Zonen stellt für das Bohrloch-Streckenmodell einen erheblichen Faktor im Hinblick auf eine Erhöhung der erforderlichen Berechnungszeiten gegenüber den für das Streckenmodell benötigten Berechnungszeiten dar. Der entscheidend die Berechnungszeiten erhöhende Faktor allerdings, der gegenüber den Berechnungen mit dem quasi-zweidimensionalen Streckenabschnittsmodell zu einem signifikanten Anstieg der benötigten Berechnungszeiten im Bereich von in etwa zwei Größenordnungen für die Berechnungen mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ geführt hat und der somit hauptsächlich für eine Steigerung der erforderlichen Berechnungszeiten in einen nicht mehr beherrschbaren Zeitrahmen mit theoretisch ermittelten Berechnungszeiträumen von $t_B > 10$ Jahren hinein verantwortlich ist, ist jedoch die erforderliche Feinheit der Diskretisierung im Konturbereich des Bohrlochs. Aufgrund dieser eingeschätzten extrem hohen zu erwar-



tenden Berechnungszeiträume ist es nicht mehr möglich, Berechnungen mit dem Simulator FLAC^{3D} für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell durchzuführen. Hier sind nunmehr nur noch Berechnungen mit dem neu entwickelten FTK-Simulator möglich.

Ein Vergleich von mit dem FTK-Simulator unter Verwendung des Bohrloch-Streckenmodells berechneten Ergebnissen mit den Ergebnissen einer anderen Berechnung zur Überprüfung der mit dem Bohrloch-Streckenmodell generierten Zustandsgrößen erfolgt im Rahmen der Ergebnisauswertung trotz des Fehlens von FLAC^{3D}-Berechnungsergebnissen. Zur Durchführung dieses Ergebnisvergleichs werden die Berechnungsergebnisse für das Streckenmodell mit $n_z \approx 20.000$ Zonen herangezogen. Da die numerisch abzubildende Systemgeometrie für das kombinierte Bohrloch-Streckenmodell und das Streckenmodell bis zur Simulation des Abteufens des Bohrlochs sich nicht voneinander unterscheiden und die Modelldiskretisierungen in beiden betrachteten Modellen ebenfalls abgesehen von der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochs genau identisch sind, ist es möglich, die ermittelten Zustandsgrößen für den Zeitpunkt unmittelbar vor der Simulation des Bohrlochabteufens für die beiden Modelle miteinander zu vergleichen und somit zumindest die Korrektheit der mit dem FTK-Simulator für das kombinierte Bohrloch-Streckenmodell generierten Berechnungsergebnisse bis zu diesem Zeitpunkt zu gewährleisten.

Einzig für die Ergebnisse der Simulation des Bohrlochabteufens mit dem kombinierten Bohrloch-Streckenmodell besteht keine Möglichkeit eines Vergleiches mit Berechnungsergebnissen, die an dem selben oder an einem vergleichbaren Modell mit einem renommierten Simulator generiert worden sind. Bezüglich der mit dem FTK-Simulator unter Verwendung des Bohrloch-Streckenmodells berechneten Ergebnisse für das Bohrlochabteufen können die berechneten Zustandsgrößen im Rahmen der Ergebnisanalyse damit lediglich im Hinblick auf ihre grundsätzliche Plausibilität aus geomechanischer sowie geohydraulischer Sicht untersucht werden. Eine präzise Überprüfung der zahlenmäßigen Richtigkeit der berechneten Zustandsgrößen ist aus den bereits beschriebenen Gründen anhand eines Vergleiches mit Ergebnissen, die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechnet worden sind, nicht möglich. Darüber hinaus ist für die sich aus der Überlagerung der hydraulischen und mechanischen Nahfelder von Strecke und Bohrloch ergebende geomechanisch-geohydraulische Simulation mit einem daraus resultierenden komplexen hydraulischen Potenzialfeld und einem ebenfalls resultierenden komplexen Sekundärspannungsfeld keine Überprüfung der ermittelten Zustandsgrößen auf Basis einer analytischen Lösung oder bereits vorhandener Berechnungsdaten von dritter Seite

möglich gewesen. Bezüglich der quantitativen Korrektheit kann somit keine Überprüfung der mit dem FTK-Simulator für die dreidimensionale Simulation des Bohrlochabteufens im kombinierten Bohrloch-Streckenmodell generierten Ergebnisse vorgenommen werden. Es kann damit bezüglich der Verifikation bzw. der Validation der Ergebnisse für die Simulation des Bohrlochabteufens unter Verwendung des kombinierten Bohrloch-Streckenmodells lediglich auf den in Abschnitt 6.4.3.6 detailliert beschriebenen Vergleich zwischen den mit dem Simulator FLAC^{3D} und mit dem FTK-Simulator für das dreidimensionale Bohrlochmodell berechneten Ergebnissen als Indiz für die gute Funktionsweise des FTK-Simulators bei der dreidimensionalen Vortriebssimulation verwiesen werden.

6.4.3.2 Einige Anmerkungen zu den Berechnungsgrundlagen

Allen im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten numerischen Simulationen liegen identische gebirgsmechanische Rahmenbedingungen sowie identische Annahmen bezüglich der verwendeten mechanischen und hydraulischen Gebirgsparameter zugrunde. Die gebirgsmechanischen Rahmenbedingungen für die im Folgenden detailliert vorgestellten und mit den Simulatoren FLAC^{3D} und FTK durchgeführten numerischen Berechnungen sind auf das Mont Terri Underground Rock Laboratory (URL Mont Terri) bei St. Ursanne in der Schweiz spezialisiert worden. Die Spezialisierung der numerischen Untersuchungen auf die gebirgsmechanischen Verhältnisse im URL Mont Terri ist im Hinblick auf die dort durchgeführten und in Abschnitt 3.1 bereits vorgestellten Bohrlochobservationsarbeiten orientiert.

Die numerischen Untersuchungen zum Tragverhalten des Streckenabschnitts sind aufgrund der starken Abstraktion der in situ vorliegenden Situation als generisch zu bezeichnen, sind jedoch bezüglich der Hohlraumgeometrie an die Verhältnisse der im URL Mont Terri vorzufindenden Niche MI angelehnt, in der sich die Ansatzpunkte von insgesamt sieben der in Abschnitt 3.1 vorgestellten Observationsbohrlöcher befinden.

Die durchgeführten numerischen Simulationen zum Bohrlochtragverhalten beziehen sich auf ein innerhalb der Niche MI befindliches fiktives horizontales Bohrloch. Im Rahmen der in Abschnitt 3.1 vorgestellten in situ-Untersuchungen ist unter anderem das innerhalb der Niche MI gelegene horizontale Bohrloch BDMB-1 observiert worden. Zwar entspricht der Durchmesser des modellierten Bohrlochs mit $d_{BL} = 101$ mm dem Ausgangsdurchmesser des Observationsbohrlochs BDMB-1, jedoch ist es im Rahmen der durchgeführten Modellierungsarbeiten aufgrund der zur Beschränkung der Berechnungszeiten notwendigen Ein-



schränkungen bezüglich der Zonenanzahl im Bohrloch-Streckenmodell nicht möglich gewesen, die genaue Position des Bohrlochs BDMB-1 innerhalb der Niche MI abzubilden. Weiterhin musste in dieser ersten Analyse darauf verzichtet werden, das Observationsbohrloch BDMB-1 über seine gesamte Länge von $l = 30$ m in das Berechnungsmodell zu integrieren, weshalb die numerischen Untersuchungen zum Bohrlochtrag- und -deformationsverhalten ebenfalls als generisch zu bezeichnen sind. Allerdings ist aufgrund der geometrischen Parameter davon auszugehen, dass mit dem Berechnungsmodell sowohl die mechanisch-hydraulische Situation eines Bohrlochs im Streckennahfeld wie auch im Streckenfernfeld erfasst wird.

Bezüglich der im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten numerischen Simulationen ist hervorzuheben, dass sie nicht primär der Analyse des Tragverhaltens der Observationsbohrlöcher gedient haben, sondern vielmehr zunächst der Validierung des FTK-Simulators durch einen Vergleich mit vom Simulator FLAC^{3D} generierten Berechnungsergebnissen sowie dann auch der Schaffung von ersten Grundlagen für eine geomechanisch-geohydraulisch gekoppelte Simulation des Trag- und Deformationsverhaltens von Observationsbohrlöchern im Streckennahfeld. Hervorzuheben ist, dass die Ergebnisse des Simulators FLAC^{3D} nicht von vornherein kritiklos als zahlenmäßig und gebirgsmechanisch richtig unterstellt werden. Auch hier sind die jeweiligen in die physikalische Modellierung eingehenden Ansätze sowie die numerische Stabilität und Konvergenz in Richtung einer unbekannt analytisch exakten Lösung zu bedenken.

6.4.3.3 Berechnungsgrundlagen

(a) *Vorbemerkung*

Grundlegend erforderlich für die Berechnungen zur Analyse des Bohrloch- und Streckentragverhaltens sind zunächst Vorgaben zu den Gebirgsverhältnissen und zu Gebirgseigenschaften sowie zur Bohrloch- und Streckenkonfiguration. Die nachfolgend angegebenen Daten gelten für alle in dem vorliegenden Bericht vorgestellten Berechnungen.



(b) Gebirgsverhältnisse

(b 1) Aufbau des Tonsteingebirges im URL Mont Terri

Grundsätzlich handelt es sich beim Opalinuston des URL Mont Terri um eine anisotrope und bezogen auf den Größenmaßstab der Observationsbohrlöcher nur eingeschränkt als homogen zu betrachtende Gesteinsformation. Die Anisotropie beruht auf dem vorhandenen Schichtflächengefüge. Heterogenitäten im Gebirgsbau mit Auswirkungen auf das Tragverhalten der Observationsbohrlöcher sind in Abschnitt 3.1 ausführlich dargestellt und diskutiert worden und können exemplarisch in Bild 3.16 und Bild 3.17 betrachtet werden. Ein mechanisch-hydraulisch signifikant wirksames Großgefüge ist nicht anzunehmen.

Für die im Rahmen der Erstellung des vorliegenden Berichts durchgeführten numerischen Berechnungen ist vereinfachend von einem linear-elastischen Materialverhalten des Opalinustons ausgegangen worden. Der Aufbau des Tonsteingebirges ist weiter für den Untersuchungsbereich als homogen und isotrop angenommen worden, sodass den Berechnungen das Stoffmodell nach Hooke zu grunde gelegt werden kann unter Einbeziehung der beiden Materialkennwerte Verformungsmodul E_v und Poissonzahl ν .

Für die Berechnungen mit dem dreidimensionalen kombinierten Bohrloch-Streckenmodell ist im Rahmen der Ergebnisauswertung im Nachlauf ein Schichtungsgefüge unterstellt worden und es sind zusätzlich Schichtflächenausnutzungsgrade berechnet worden. Hierzu ist zunächst die realitätsgetreue Situation des Einfallens der Schichtflächen von Norden nach Süden unter einem Fallwinkel von $\alpha \approx 45^\circ$ innerhalb des URL Mont Terri betrachtet worden, bevor in zwei weiteren Auswertungsvarianten zum einen ein Einfallen der Schichtflächen unter $\alpha \approx 45^\circ$ von Westen nach Osten angenommen worden ist und zum anderen der Fall eines horizontalen Verlaufs der Schichtflächen mit $\alpha = 0^\circ$ betrachtet worden ist. Die Lage der Schichtungsflächen im Raum kann unter Bezug auf das angesetzte Koordinatensystem durch den Normalenvektor beschrieben werden. Der Normalenvektor auf den Schichtungsflächen ergibt sich für den der Realität entsprechenden Fall für das URL Mont Terri zu:

n_x	0
n_y	-1
n_z	1

Tabelle 6.4: Normalenvektor der Schichtungsflächen im URL Mont Terri für das angesetzte Koordinatensystem mit x-Richtung nach Osten – orthogonal zur Längsachse des Haupttunnels, y-Richtung nach Norden – entlang der Längsachse des Haupttunnels und z-Richtung vertikal



Bild 6.78 zeigt eine dreidimensionale Ansicht des URL Mont Terri mit dem Verlauf der Tunnel und Strecken sowie verschiedener Querschnitte, die im URL als Gallery oder Nische bezeichnet werden und spezifischen Untersuchungen dienen. Die hier relevante Nische MI ist grafisch hervorgehoben.

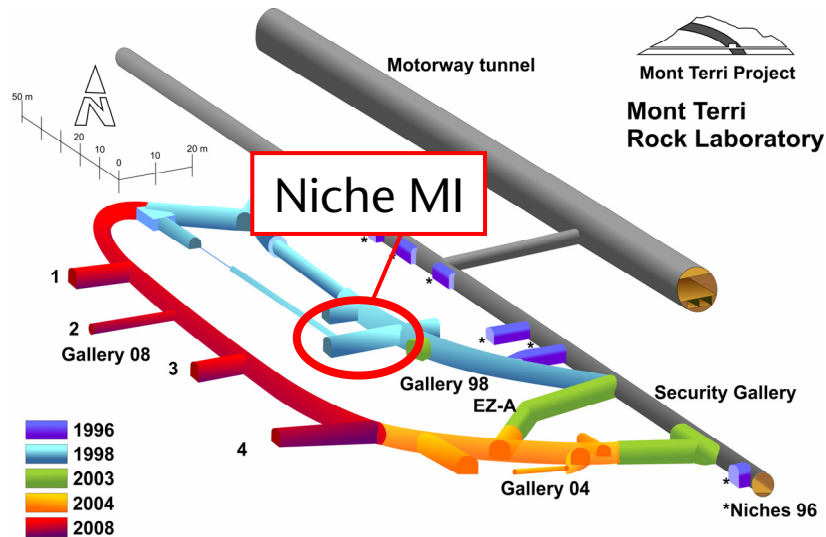


Bild 6.78: 3D-Ansicht des URL Mont Terri mit einer grafischen Hervorhebung der Nische MI, modifiziert nach Bossart & Thury (2008)

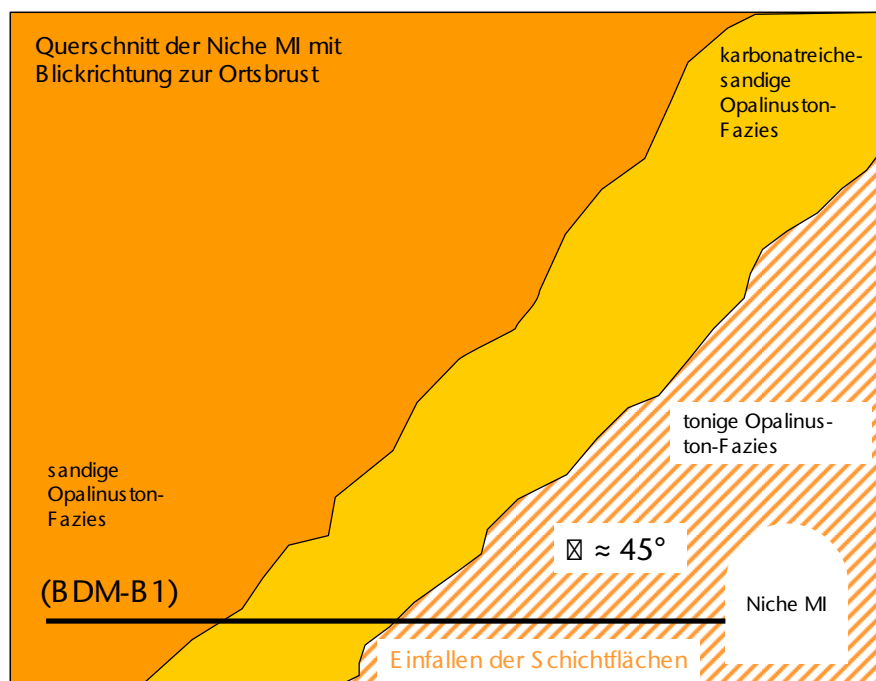


Bild 6.79: Querschnitt der Nische MI (Blick von der Gallery 98 in Richtung der Ortsbrust der Nische MI) mit einer Andeutung des Einfallens der Schichtflächen unter $\alpha \approx 45^\circ$ im betrachteten Gebirgsbereich sowie Informationen zum geologischen Aufbau des Gebirges und der Positionierung des Observationsbohrlochs BDM-B1



In Bild 6.79 ist ein Querschnitt der Niche MI und des umgebenden Gebirges dargestellt, in den neben dem Verlauf der unter $\alpha \approx 45^\circ$ einfallenden Schichtflächen auch die Position eines der Observationsbohrlöcher (BDM-B1) sowie der geologische Aufbau des umgebenden Gebirges eingetragen worden ist.

(b 2) Primärspannungszustand

Im URL Mont Terri ist aus in situ Messungen ein anisotroper primärer Gebirgsspannungszustand ermittelt worden. Gemäß *Martin & Lanyon (2003)* liegen die aus den Messergebnissen abgeleiteten Primärspannungskomponenten in Zahlenwertbereichen von $6 \text{ MPa} \leq \sigma_1 \leq 7 \text{ MPa}$, $4 \text{ MPa} \leq \sigma_2 \leq 5 \text{ MPa}$ und $0,6 \text{ MPa} \leq \sigma_3 \leq 2 \text{ MPa}$. Da die in diesem Abschnitt vorgestellten numerischen Berechnungen, wie vorangehend bereits erwähnt, nicht auf eine möglichst realitätsnahe Abbildung des in situ zu beobachtenden Tragverhaltens der Observationsbohrlöcher abzielen, sondern primär auf die Erprobung und Validierung des FTK-Simulators ausgerichtet sind, ist für die Durchführung der numerischen Simulationsarbeiten vereinfachend von einem isotropen primären Gebirgsspannungszustand mit den Hauptspannungskomponenten $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = 6,5 \text{ MPa}$ in der betrachteten Teufenlage von $z = 265 \text{ m}$ ausgegangen worden.

(b 3) Primärer Porenwasserdruck

In der betrachteten Teufenlage von $z = 265 \text{ m}$ beträgt der primäre Porenwasserdruck theoretisch maximal $P_{w0} = 2,65 \text{ MPa}$. Allerdings geben *Martin et al. (2004)* primäre Porenwasserdrücke von $1,0 \text{ MPa} \leq P_{w0} \leq 2,0 \text{ MPa}$ für das URL Mont Terri als wahrscheinlich an. Bezüglich des primären Porenwasserdrucks ist für die durchgeführten Berechnungen daher von einem Zahlenwert von $P_{w0} = 2,0 \text{ MPa}$ ausgegangen worden.

(c) Gebirgseigenschaften

(c 1) Tektonisch bedingtes Großgefüge

Grundsätzlich ist für den hier relevanten Größenordnungsbereich der Observationsbohrlöcher vereinfachend davon ausgegangen worden, dass ein tektonisch bedingtes Großgefüge (Diskontinuitäten wie Klüfte oder Störungen) nicht vorhanden beziehungsweise mechanisch nicht relevant ist. Damit können die laborativ ermittelten Gesteinseigenschaften unter Berücksichti-



gung ihrer Streubreite unmittelbar auf das als Homogenbereich betrachtete Tonsteingebirge übertragen werden.

(c 2) *Mechanische Eigenschaften des Gebirges und Gebirgskennwerte*

Das Gebirgsverhalten wird im Rahmen der numerischen Berechnungen zunächst mit einem linear-elastischen Stoffmodell beschrieben. Die Berechnung der Ausnutzungsgrade in der Gebirgsmatrix sowie in den Schichtflächen erfolgt im Rahmen der Ergebnisauswertung unter Ansatz des *Mohr-Coulomb*'schen Bruchkriteriums. Die Berechnungsparameter für das Stoffmodell *Hooke* zur Abbildung von linear-elastischem Materialverhalten sowie darüber hinaus auch die *Mohr-Coulomb*-Parameter zur Bestimmung der Bruchfestigkeit für die Gesteinsmatrix und die Schichtungsflächen sind *Bock (2001)* und *Czaikowski (2011)* entnommen worden. Die in *Bock (2001)* und *Czaikowski (2011)* als Gebirgskennwerte angegebenen Zahlenwerte sind zum Teil noch konservativ abgemindert worden. Die schließlich für die durchgeführten Berechnungen angesetzten Gebirgskennwerte sind in Tabelle 6.5 zusammengestellt:

(c 3) *Hydraulische Eigenschaften*

Für die im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen wird von einem primären Sättigungsgrad des Gesteins von $S_r = 1$ ausgegangen. Der *Biot*'sche Koeffizient des Gesteins und die Porosität des Gesteins werden mit $\alpha = 1,0$ und mit $n = 0,15$ angenommen. Für die Permeabilität des Gebirges wird der Zahlenwert $k_f = 1 \cdot 10^{-10}$ m/s angesetzt. Die für die hydraulischen Eigenschaften angegebenen Zahlenwerte sind in Anlehnung an *Bock (2001)* abgeschätzt und bezüglich der Permeabilität durch Modifikation um zwei bis drei Größenordnungen nach oben an die spezifischen Anforderungen zur Validierung des FTK-Simulators angepasst worden (in situ $k_f = 1 \cdot 10^{-12}$ bis $1 \cdot 10^{-13}$ m/s; Validierung $k_f = 1 \cdot 10^{-10}$ m/s).

Anmerkung: Für die durchgeführten Berechnungen ist die Permeabilität des ungestörten *Opalinustons im URL Mont Terri* mit einem Zahlenwert von $k_f = 1 \cdot 10^{-10}$ m/s sehr hoch angesetzt worden. Gegenüber den der Literatur zu entnehmenden Zahlenwerten von $k_f = 10^{-12}$ bis 10^{-13} m/s ist der verwendete Zahlenwert um in etwa zwei bis drei Größenordnungen erhöht worden. Die Erhöhung der Permeabilität zur Durchführung der numerischen Simulationen im



<i>Gebirgsparameter zum Deformationsverhalten</i>	
Verformungsmodul E_v	5000 MPa
Poissonzahl ν	0,27
<i>Gebirgsparameter zur Bruchfestigkeit</i>	
Kohäsion der Gesteinsmatrix c_M	3 MPa
Innere Reibung der Gesteinsmatrix φ_M	25°
Zugfestigkeit der Gesteinsmatrix β_{ZM}	1 MPa
Kohäsion in den Schichtflächen c_J	1 MPa
Innere Reibung in den Schichtflächen φ_J	17°
Zugfestigkeit in den Schichtflächen β_{ZJ}	0,5 MPa

Tabelle 6.5: Gebirgskennwerte für Berechnungen mit einem linear-elastischen Stoffmodell sowie für die Berechnung der Ausnutzungsgrade unter Bezugnahme auf das Mohr-Coulomb'sche Bruchkriterium

Rahmen dieses Vorhabens ist erfolgt, da insbesondere im Streckennahfeld durch die im Zuge der Streckenauffahrung stattfindenden Spannungsumlagerungen dilatante und pseudo-plastische Gebirgsbereiche entstehen können, in denen dann eine gegenüber der Primärpermeabilität stark erhöhte Sekundärpermeabilität vorliegt. Außerdem und insbesondere stellt bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen das Erfassen von längeren Zeiträumen bei vorliegenden relativ großen Gebirgspermeabilitäten im Vergleich zu relativ geringen Gebirgspermeabilitäten signifikant höhere Anforderungen an die Leistungsfähigkeit des Simulationsinstrumentariums. Da zum einen der neu entwickelte FTK-Simulator insbesondere auch im Bereich großer Gebirgspermeabilitäten auf seine Leistungsfähigkeit hin überprüft werden sollte und da sich zum anderen die durchgeführten numerischen Simulationsarbeiten auf ein Bohrloch im Streckennahfeld, in dem zumindest in Teilbereichen mit großer Wahrscheinlichkeit auffahrungsbedingt erhöhte Gebirgspermeabilitäten



vorliegen, beziehen, ist für die im vorliegenden Abschnitt vorgestellten numerischen Simulationsarbeiten für die vorhandene Gebirgspermeabilität ein Zahlenwert von $k_f = 1 \cdot 10^{-10}$ m/s zugrunde gelegt worden.

(d) Bohrlochgeometrie

Die modellierten Bohrlöcher innerhalb der zwei nachfolgend vorgestellten Bohrlochmodelle und innerhalb des ebenfalls nachfolgend beschriebenen Bohrloch-Streckenmodells haben einheitlich einen Anfangsdurchmesser von $d = 101$ mm. Dieser Durchmesser ist im Hinblick auf die in situ im URL Mont Terri durchgeführten Bohrlochobservationsarbeiten gewählt worden. Die Länge des modellierten Bohrlochs im Bohrloch-Streckenmodell beträgt $l_{BL} = 6$ m.

(e) Streckengeometrie

Die modellierte Strecke, die nachfolgend im quasi-zweidimensionalen Streckenmodell und im dreidimensionalen, kombinierten Bohrloch-Streckenmodell zu betrachten ist, ist bezüglich ihrer Querschnittsgeometrie der Kontur der innerhalb des URL Mont Terri gelegenen Nische MI angenähert worden. Sie weist eine Breite von $b = 4$ m sowie eine Höhe von $h = 4,9$ m auf. Der Stich des modellierten Firstgewölbes beträgt $r_f = 2$ m. Anders als in der realen Kontur der Nische MI ist zur Minimierung von unrealistisch hohen Spannungsspitzen innerhalb des numerischen Modells ein Viertelkreissegment mit einem Radius von $r_s = 0,5$ m zur geometrischen Gestaltung des Übergangs zwischen der Streckensole und dem Stoßbereich der Strecke in die Kontur eingefügt worden.

(f) Festlegung der Randbedingungen (mechanisch, hydraulisch)

In allen Fällen sind die Berandungsflächen der Berechnungsmodelle abgesehen von der oberen horizontalen Berandungsfläche in der jeweiligen Normalenrichtung unverschieblich gelagert. Die primären Gebirgsspannungskomponenten verlaufen jeweils in Normalenrichtung der jeweiligen Berandungsfläche.

Bei allen vier zum Einsatz gekommenen Berechnungsmodellen ist der modellierte Hohlraum mit dem umgebenden Gebirge zur Reduzierung der Zonenanzahl durch die Ausnutzung von Symmetriebedingungen entlang von einer Symmetrieebene (Streckenmodell) oder entlang



von zwei Symmetrieebenen (Viertelscheibenmodell des Bohrlochs, dreidimensionales Bohrlochvortriebsmodell und kombiniertes Bohrloch-Streckenmodell) in seiner räumlichen Ausdehnung begrenzt worden, sodass der modellierte Hohlraum im quasi-zweidimensionalen Viertelscheibenmodell von vier der sechs Berandungsflächen des Modells geschnitten wird und in den drei weiteren Modellen von jeweils drei der sechs Berandungsflächen.

In allen Berechnungsmodellen gilt, dass diejenigen Berandungsflächen, die das modellierte Bohrloch oder die modellierte Strecke schneiden, als hydraulisch undurchlässig betrachtet worden sind. An allen anderen, d.h. an den äußeren Berandungsflächen des Berechnungsmodells ist für alle durchgeführten Berechnungen der primäre hydrostatische Porenwasserdruck mit $P_W = 2,0 \text{ MPa}$ in $z = -265 \text{ m}$ Teufe als Randbedingung fixiert worden. An allen Hohlraumkonturen ist der Porenwasserdruck unmittelbar nach dem Hohlraumausbruch auf einen Zahlenwert von $P_{wk} = 0,11 \text{ MPa}$ und somit auf einen Zahlenwert unmittelbar oberhalb des atmosphärischen Luftdrucks festgesetzt worden. Die Fixierung des Porenwasserdruckes auf einen geringfügig oberhalb des atmosphärischen Luftdruckes gelegenen Zahlenwert ist erfolgt, um ein Eindringen von Luft in den Porenraum des Gesteins und die damit zwangsläufig einhergehende Ausbildung eines Zweiphasenflusses zu unterbinden. Um die Einwirkung des atmosphärischen Luftdruckes mechanisch abzubilden und somit entlang der Hohlraumkonturen bereits unmittelbar zu Beginn der Berechnungen in radialer Richtung die Ausbildung eines effektiven Spannungszustandes von $\sigma_{r_eff} = 0 \text{ MPa}$ zu ermöglichen, ist nach dem Hohlraumausbruch parallel zur Fixierung des Porenwasserdruckes auf den Zahlenwert $P_{wk} = 0,11 \text{ MPa}$ der radial bzw. normal zur Hohlraumkontur wirkende mechanische Innendruck ebenfalls für alle Berechnungen auf einen Zahlenwert von $P_i = 0,11 \text{ MPa}$ festgelegt worden.

6.4.3.4 Grundlegende Anmerkungen zum Vergleich der Berechnungsergebnisse des FTK-Simulators mit den Berechnungsergebnissen des Simulators FLAC^{3D}

(a) Vorbemerkung

Im Rahmen der Anfertigung des vorliegenden Berichts hat sich herauskristallisiert, dass die Vorgehensweise bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulationen des Gebirgstragverhaltens sowohl unter Anwendung des Simulators FLAC^{3D} wie auch bei der Anwendung des FTK-Simulators einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf die vom jeweiligen Simulator generierten Berechnungsergebnisse hat. Daher besteht für die Durchfüh-



zung eines aussagekräftigen Vergleichs der von den beiden Simulatoren berechneten Ergebnisse zunächst die Notwendigkeit, die jeweils angewendeten Vorgehensweisen bei der Durchführung der numerischen Simulationen zu erläutern.

(b) Grundlegende Aspekte bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulationen mit dem Simulator FLAC^{3D} mit den im Rahmen dieses Vorhabens verwendeten Tragwerksmodellen

Bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulationen mit dem Simulator FLAC^{3D} wird in Abhängigkeit von der im Gebirge vorherrschenden Permeabilität einerseits und der Feinheit der Diskretisierung andererseits programmintern ein hydraulischer Zeitschritt Δt_h festgelegt, welcher für die Dauer der gesamten Berechnung konstant bleibt. Mit jedem vom Programm durchgeführten hydraulischen Berechnungsschritt wächst der simulierte Zeitraum somit um den hydraulischen Zeitschritt Δt_h an. Besonders klein wird der automatisch generierte hydraulische Zeitschritt vom Simulator FLAC^{3D} dann festgelegt, wenn bei einer feinen Diskretisierung gleichzeitig hohe Gebirgspemeabilitäten vorliegen. In diesem Fall ist zu erwarten, dass sich in den bedingt durch die feine Diskretisierung nah beieinander liegenden Knotenpunkten des Modells in Bezug auf die Zeit sehr große Porenwasserdruckänderungen ergeben, die dann bei einem zu großen hydraulischen Zeitschritt zu numerischen Instabilitäten führen können. Genau für den Fall der im Rahmen dieses Vorhabens zu simulierenden gebirgsmechanischen Gesamtsituation eines Bohrlochs im Nahfeld einer Strecke gestalten sich die für die Festlegung des hydraulischen Zeitschritts relevanten Parameter zwangsläufig derart, dass im Verhältnis zu dem zu simulierenden Gesamtzeitraum ein sehr kleiner hydraulischer Zeitschritt resultieren muss. Aus interner Festlegung eines im Verhältnis zum zu simulierenden Gesamtzeitraum sehr kleinen hydraulischen Zeitschrittes ergeben sich wiederum sehr große Berechnungszeiten. Die Reduzierung von sehr großen erforderlichen Berechnungszeiten kann bei der Verwendung des Simulators FLAC^{3D} nur bedingt durch eine vorausschauende, die Anzahl der benötigten Zonen reduzierende Diskretisierung erfolgen. Aber auch bei einer in Bezug auf die Zonenanzahl und Zonengröße vorausschauend und umsichtig erfolgenden Diskretisierung besteht die Notwendigkeit einer detaillierten Modellierung von filigranen Tragsystembereichen wie beispielsweise dem Bohrloch in Relation zu der Strecke in dem in Abschnitt 6.4.3.8 vorgestellten und diskutierten dreidimensionalen kombinierten Bohrloch-Streckenmodell. Für die Festlegung des hydraulischen Zeitschrittes ist es



dabei nicht relevant, wie viele Zonen einer bestimmten Größe innerhalb des gesamten Modells vorhanden sind, sondern es ist einzig und allein die Zone mit dem kleinsten Abstand zwischen zwei benachbarten Zonenmittelpunkten entscheidend für die Begrenzung des hydraulischen Zeitschritts.

Am Beispiel des kombinierten Bohrloch-Streckenmodells lässt sich verdeutlichen, welche Herausforderung das Vorhandensein einer im Verhältnis zur Systemgesamtgröße filigranen Systemkomponente für ein numerisches Simulationsprogramm in Bezug auf die Berechnungszeit darstellt. Das Gesamtmodell benötigt hinreichend große Systemabmessungen, um auch das sekundäre hydraulische Potenzialfeld für den modellierten Streckenabschnitt im betrachteten Zeitraum realitätsnah abbilden zu können. Für das im Rahmen der hier beschriebenen numerischen Simulationsarbeiten zum Einsatz gekommene Bohrloch-Streckenmodell ist ein Mindestgrößenverhältnis zwischen Streckenradius und Modellaußengrenze von $r_{st} / b_{mod} = 1:50$ gewählt worden. In der Umsetzung in die Praxis folgt daraus, dass das Berechnungsmodell mit einer Breite von $b_{mod} = 100$ m sowie einer Gesamthöhe von $h_{mod} = 200$ m zu modellieren gewesen ist. Um darüber hinaus auch die Überlagerung des sekundären hydraulischen Potenzialfelds der Strecke mit dem hydraulischen Potenzialfeld des Bohrlochs im Nahfeld der Strecke sinnvoll abbilden zu können, ist das Gesamtmodell orthogonal zur Längsachse des Bohrlochs mit einer Ausdehnung in Richtung der Streckenlängsachse von $l_{mod} = 3$ m modelliert worden. Orthogonal zur Bohrlochlängsachse liegt somit ein Verhältnis des Bohrlochradius $r_{bl} = 0,0505$ m zur Mindestausdehnung des Modells von $r_{bl} / l_{mod} \approx 1:60$ vor. Aus den Außenmaßen lässt sich das Gesamtvolumen des kombinierten Bohrloch-Streckenmodells von $V_{mod} = 60000$ m³ berechnen. Die direkt an der Bohrlochkontur gelegenen kleinsten Zonen des Modells, bei deren Dimensionierung der Anspruch zugrunde gelegen hat, das Bohrloch als vollwertigen Teil des Gesamtsystems auch unter gebirgsmechanischen Aspekten bezüglich seines hydraulisch-mechanisch gekoppelten Trag- und Deformationsverhaltens analysierten zu können, haben ein Volumen von $V_{El_min} \approx 7,7 \cdot 10^{-6}$ m³, wobei der kleinste Abstand zwischen zwei benachbarten Zonenmittelpunkten 1,3 cm beträgt. Die größten Zonen im Randbereich des Modells haben im Vergleich dazu ein Volumen von $V_{El_max} \approx 389,4$ m³.

Aus der Betrachtung der vorstehend skizzierten Größenverhältnisse von Zonen innerhalb des Berechnungsmodells verdeutlicht sich, dass aus der Kombination von zwei in ihren räumlichen Ausmaßen stark unterschiedlichen Tragsystemkomponenten innerhalb desselben Be-



rechnungsmodells das Vorhandensein von sehr kleinen Zonen in einem in seinen räumlichen Abmessungen sehr großen Gesamtmodell resultiert. Da, wie vorangehend bereits beschrieben worden ist, die Zone mit dem geringsten Zonenmittelpunktsabstand ausschlaggebend ist für die Festlegung des hydraulischen Zeitschritts, folgt aus den vorliegenden Größenverhältnissen, dass mit einem sehr kleinen, aufgrund der für die Abmessungen eines Bohrlochs festgelegten Diskretisierung dimensionierten Zeitschritt die zeitabhängige Entwicklung eines sekundären hydraulischen Potenzialfeldes für ein sehr großes modelliertes Gebiet berechnet werden muss, dessen räumliche Ausdehnung aus den Abmessungen eines Streckenquerschnitts resultiert. Da der Porenwasserdruckabbau in tiefer im Gebirge gelegenen Bereichen ein langwieriger Prozess ist, bei dem ein stationärer Zustand häufig erst nach vielen Jahren erreicht wird, ist es erforderlich, mit dem auf einen kleinen Zahlenwert fixierten Zeitschritt eine numerische Simulation für einen langen Zeitraum vorzunehmen. Hierzu ist dementsprechend eine große Anzahl von Rechenschritten erforderlich, die wiederum die Erfordernis einer sehr langen Berechnungszeit mit sich bringt.

Sehr gut veranschaulichen lässt sich der beschriebene Sachverhalt anhand der vergleichenden Betrachtung des notwendigen Berechnungszeitraums für das in Abschnitt 6.4.3.7 vorgestellte Streckenmodell mit dem notwendigen Berechnungszeitraum für das in Abschnitt 6.4.3.8 vorgestellte kombinierte Bohrloch-Streckenmodell. Für das Streckenmodell befinden sich die am feinsten diskretisierten Zonen in der unmittelbaren Umgebung der Streckenkontur. Aufgrund der Abmessungen der Zonen an der Streckenkontur beschränkt der Simulator $FLAC^{3D}$ den hydraulischen Zeitschritt auf einen Zahlenwert von $\Delta t_h = 14,5$ s. Mit der Fixierung des hydraulischen Zeitschrittes auf einen Zahlenwert von $\Delta t_h = 14,5$ s benötigt die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation eines Zeitraums von $t_{ges} = 4096$ d, der in etwa dem erforderlichen Zeitraum zum Erreichen des stationären Strömungszustands entspricht, unter Verwendung des 20000 Zonen umfassenden Streckenmodells mit dem Simulators $FLAC^{3D}$ einen realen Zeitraum von $t_{real} \approx 12$ Wochen. Wie zuvor bereits in Abschnitt 6.4.3.1 im Rahmen der Vorstellung der Systematik der Vorgehensweise und der Beschreibung der entwickelten Berechnungsmodelle erläutert worden ist, sind das Streckenmodell und das kombinierte Bohrloch-Streckenmodell abgesehen von der Diskretisierung der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochs in Bezug auf ihre Diskretisierung genau identisch. Es lässt sich somit festhalten, dass es sich bei dem kombinierten Bohrloch-Streckenmodell um eine um die Diskretisierung des Bohrlochs ergänzte Version des Streckenmodells handelt.



Für das kombinierte Bohrloch-Streckenmodell mit der feinen Diskretisierung des Bohrlochs und der Bohrlochumgebung, das aus insgesamt 90000 Zonen besteht, fixiert der Simulator FLAC^{3D} den hydraulischen Zeitschritt programmintern auf einen Zahlenwert von $\Delta t_h = 0,14$ s und somit in etwa auf ein Hundertstel des für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnung mit dem Streckenmodell festgelegten Zahlenwertes für den hydraulischen Zeitschritt. Mit jedem vom Simulator durchgeführten Berechnungsschritt lässt sich somit für das kombinierte Bohrloch-Streckenmodell aufgrund der Feinheit der Diskretisierung nur in etwa ein Hundertstel des Zeitraumes simulieren der für das Streckenmodell in jedem Berechnungsschritt benötigt wird. Wird vereinfachend davon ausgegangen, dass ein Berechnungsschritt für das 90000 Elemente umfassende Bohrloch-Streckenmodell genauso viel Rechenzeit benötigt wie ein Berechnungsschritt für das 20000 Elemente umfassende Streckenmodell, resultiert aus der Reduzierung des hydraulischen Zeitschritts auf ein Hundertstel in etwa eine Verhundertfachung der Berechnungszeit für das Bohrloch-Streckenmodell gegenüber dem Streckenmodell. Da wie bereits beschrieben die Berechnungszeit für das Berechnungsmodell des Streckenabschnitts zur Simulation eines Zeitraumes von $t_{ges} = 4096$ d mit dem Simulator FLAC^{3D} einen realen Zeitraum von $t_{real} \approx 12$ Wochen in Anspruch genommen hat, hätte sich für das kombinierte Bohrloch-Streckenmodell theoretisch eine reale Berechnungszeit von mindestens $t_{real} \approx 20$ a ergeben. Die zur Simulation benötigte Echtzeit würde somit in etwa den doppelten Zahlenwert des zu simulierenden Strömungszeitraums in Anspruch nehmen. Die Verwendung des Simulators FLAC^{3D} stellt somit schon aufgrund dieser Vorüberlegungen keine Option zur hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulation des Trag- und Deformationsverhaltens des kombinierten Tragsystems aus Bohrloch und Strecke dar.

Für die drei anderen im Rahmen dieses Vorhabens erstellten Berechnungsmodelle ist die Durchführung von Berechnungen mit dem Simulator FLAC^{3D} innerhalb von akzeptablen Zeiträumen möglich gewesen und daher auch durchgeführt worden. Daher werden in diesem Abschnitt nachfolgend unter (c) die zwei grundsätzlich zu unterscheidenden Möglichkeiten zur Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen mit dem Simulator FLAC^{3D} beschrieben. Anzumerken ist abschließend, dass sich die skizzierten Sachverhalte auf die derzeit eingesetzte Hardware beziehen. Eine leistungsfähigere Hardware könnte hier noch die zur Simulation benötigten Echtzeiten verringern, ändert aber nichts an der grundsätzlichen Thematik.



(c) ***Mögliche Vorgehensweisen bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulationen mit dem Simulator FLAC^{3D}***

Zur Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen mit dem Simulator FLAC^{3D} bestehen zwei unterschiedliche Optionen bezüglich der Vorgehensweise.

Anmerkung: Nachfolgend werden die unterschiedlichen Möglichkeiten zur Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen mit dem Simulator FLAC^{3D} erläutert. Die Ausführungen beziehen sich dabei auf die Durchführung von Berechnungen mit dem linear-elastischen Stoffmodell Hooke, wie sie im Rahmen der Anfertigung des vorliegenden Berichts erfolgt sind. Dadurch wird der zu erläuternde Sachverhalt dahingehend vereinfacht, dass zu Beginn der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnung ein mechanisch ausbalanciertes Gesamtsystem vorliegt, in dem die im Rahmen der weiteren mechanischen Balancierung auszugleichenden Kräfteungleichgewichte ausschließlich aus dem hydraulischen Strömungsprozess und den damit einhergehenden auftretenden Strömungskräften und Porenwasserdruckänderungen resultieren.

Eine während des Verlaufs der Berechnung zeitabhängig potenziell auftretende Schädigung des Gebirges mit einer dann eintretenden Spannungsumlagerung aus den plastifizierten und geschädigten Gebirgsbereichen heraus ,wie sie bei der Verwendung eines Stoffmodells zur Abbildung von elastisch-plastischem Materialverhalten mit Entfestigung denkbar wäre, oder eine Umlagerung der vorherrschenden Spannungen durch eine zeitabhängige schädigungsfreie oder schädigungsbehaftete Deformation, wie sie durch die Verwendung eines Stoffmodells zur Abbildung eines elastisch-viskosen Materialverhaltens ohne/mit Gefügeschädigung beschrieben werden kann, findet im Rahmen der folgenden Ausführungen keine Berücksichtigung.

Vorgehensweise bei der Durchführung hydraulisch-mechanisch gekoppelter Simulationen mit dem Simulator FLAC^{3D} – Variante 1

Die Variante 1 ist die vom Simulator FLAC^{3D} in der Grundeinstellung angewendete Vorgehensweise. Bei der in der Grundeinstellung (Default setting) angewandten Systematik erfolgt jeweils ein hydraulischer Berechnungsschritt, bei dem der Strömungsprozess über den hydraulischen Zeitschritt Δt_h simuliert wird, bevor im Anschluss an den hydraulischen Berechnungsschritt genau ein mechanischer Berechnungsschritt zur Ausbalancierung des durch den schwerkraftgetriebenen Strömungsprozess aufgrund von Strömungskräften und Porendruck-



änderungen erzeugten Spannungsungleichgewichtes erfolgt. Die hier beschriebene Variante 1 ist die im Rahmen dieses Vorhabens für die numerischen Simulationen mit dem Simulator FLAC^{3D} zur Anwendung gekommene Variante. Sie unterscheidet sich gegenüber der nachfolgend erläuterten Variante 2 darin, dass die Größe der während des hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungslaufes innerhalb des Systems auftretenden unbalancierten Kräfte keinen Einfluss auf den Ablauf der Berechnung hat.

Vorgehensweise bei der Durchführung hydraulisch-mechanisch gekoppelter Simulationen mit dem Simulator FLAC^{3D} – Variante 2

Anders als bei der zuvor beschriebenen Standardvorgehensweise gibt es bei einem Vorgehen nach Variante 2 die Möglichkeit, die Berechnung anhand der im System während der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnung auftretenden Kräfteungleichgewichte zu steuern. Zur Steuerung der Berechnung anhand der Kräfteungleichgewichte bei der Anwendung der Vorgehensvariante 2 ist zunächst eine Obergrenze für das innerhalb des Systems maximal tolerierbare, an einem Zonenmittelpunkt vorherrschende Kräfteungleichgewicht festzulegen. Anstatt wie bei der vorstehend beschriebenen ersten Vorgehensvariante immer einen hydraulischen und danach dann wieder einen mechanischen Berechnungsschritt auszuführen, entscheidet der Simulator FLAC^{3D} bei der Vorgehensvariante 2 während des Berechnungslaufes selbst anhand des im System während der mechanischen Ausbalancierung vorherrschenden maximalen Kräfteungleichgewichts, ob als nächstes ein weiterer mechanischer oder ein weiterer hydraulischer Berechnungsschritt erfolgt. Überschreitet das größte in einem beliebigen Zonenmittelpunkt vorherrschenden Kräfteungleichgewicht die zuvor definierte Obergrenze, werden zunächst weiter so lange mechanische Berechnungsschritte durchgeführt, bis alle aktuell im System vorhandenen Kräfteungleichgewichte unter die vorgegebene Obergrenze abgesenkt werden konnten. Erst danach erfolgt der nächste hydraulische Berechnungsschritt mit der Fortsetzung der Strömungssimulation. Im Anschluss an den hydraulischen Berechnungsschritt erfolgt erneut eine mechanische Ausbalancierung. Werden mehrere mechanische Berechnungsschritte zum Erreichen der vorgegebenen Balancierungsgenauigkeit im System erreicht, folgt anschließend erneut nur ein hydraulischer Berechnungsschritt. Kann die geforderte mechanische Balancierungsgenauigkeit jedoch aufgrund einer mit zunehmender Dauer des simulierten Zeitraumes eintretenden Abnahme der hydraulischen Aktivität im System innerhalb eines mechanischen Berechnungsschrittes erreicht werden, wird im Anschluss die Anzahl der unmittelbar hintereinander durchgeführten hydraulischen Berechnungsschritte ver-



doppelt. Die Verdoppelung der Anzahl der unmittelbar nacheinander durchzuführenden hydraulischen Berechnungsschritte kann solange fortgesetzt werden, bis es nicht mehr möglich ist, die geforderte mechanische Balancierungsgenauigkeit des Systems im Rahmen der auf den hydraulischen Part der Berechnung folgenden mechanischen Balancierung innerhalb von einem mechanischen Berechnungsschritt zu erreichen.

Anmerkung: Die vorangehende Erläuterung der Vorgehensvariante 2 dient lediglich zur Beschreibung der grundlegenden Vorgehensweise des Simulators FLAC^{3D} bei der Durchführung einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnung mit der Festlegung einer einzuhaltenden Mindestbalanciertheit der an den Zonenmittelpunkten des Berechnungsmodells wirkenden Kräfte. Im Rahmen der Erläuterung der Vorgehensweise wird nicht detailliert auf alle vom Simulator FLAC^{3D} zur Verfügung gestellten Steuerungsmechanismen eingegangen, da das Ziel der Erläuterung eine Vermittlung des grundlegenden Verständnisses für die programminterne Vorgehensweise des Simulators FLAC^{3D} bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen ist und nicht etwa eine Vermittlung sämtlicher dem Nutzer des Simulators FLAC^{3D} zur Verfügung stehenden Steuerungsparameter. Für eine ausführliche Übersicht über alle Mechanismen, die der Simulator FLAC^{3D} zur Steuerung einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnung bereitstellt, muss an dieser Stelle auf das FLAC^{3D}-Benutzerhandbuch verwiesen werden, Itasca (2009).

Im Rahmen dieses Vorhabens für die Berechnungen mit dem Simulator FLAC^{3D} gewählte Variante

Die im vorangehenden Abschnitt vorgestellte Vorgehensvariante 2 unterscheidet sich gegenüber der Vorgehensvariante 1 bezüglich der benötigten Berechnungszeiten. Bei der Simulation von Prozessen, die eine starke hydraulische Aktivität im Modell hervorrufen, wie sie beispielsweise unmittelbar nach dem Ausbruch eines Streckenabschnitts im Gebirge vorherrscht, sind die unter Anwendung der Vorgehensvariante 1 erzielten Berechnungszeiten unter Inkaufnahme einer geringeren mechanischen Balanciertheit des Systems geringer als die unter Anwendung der Vorgehensweise 2 erzielten Berechnungszeiten. Dagegen gestaltet sich die Situation für die Simulation von Prozessen, die nur eine schwache hydraulische Aktivität im Modell hervorrufen, genau andersherum. Nähert sich beispielsweise längere Zeit nach dem Ausbruch eines Streckenabschnitts das hydraulische Potenzialfeld einem stationären Zustand an und nimmt somit die hydraulische Aktivität im Berechnungsmodell ab, bleibt bei der Anwendung von Vorgehensvariante 1 die Berechnungsgeschwindigkeit von der Abnahme der



hydraulischen Aktivität unbeeinflusst. Bei der Anwendung der Vorgehensvariante 2 ermöglicht die Abnahme der hydraulischen Aktivität unter der Voraussetzung einer hinreichend genauen mechanische Balancierung des Systems hingegen die Verdoppelung der hintereinander ohne zwischenzeitliche mechanische Ausbalancierung durchführbaren hydraulischen Berechnungsschritte. Daraus resultiert bei einer hohen im System vorherrschenden Balancierungsgenauigkeit bei einer gleichzeitig tendenziell abnehmenden hydraulischen Aktivität nahezu eine Verdoppelung der Berechnungsgeschwindigkeit gegenüber einer Berechnung unter der Anwendung der Vorgehensvariante 1.

Eine intensive Befassung mit den Auswirkungen der beiden grundsätzlich zu unterscheidenden Vorgehensweisen bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen mit dem Simulator FLAC^{3D} ist im Rahmen der am Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik durchgeführten Masterarbeit mit dem Titel „Numerische Simulation des hydraulischen 1-Phasen-Flusses in porösen Medien bei hydraulisch-mechanisch gekoppelter Betrachtungsweise“ erfolgt, *Hanl (2013)*.

Da die im Rahmen der Masterarbeit ermittelten Ergebnisse einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss der gewählten Vorgehensweise auf die notwendigen Berechnungszeiten in positiver wie auch in negativer Richtung aufgezeigt haben und zum Zeitpunkt der Entstehung des vorliegenden Berichts noch keine nachhaltigen Erfahrungen mit der Anwendung von Vorgehensvariante 2 an Berechnungsmodellen mit hoher Zonenanzahl vorgelegen haben, ist zur Durchführung der numerischen Simulationen im Rahmen dieses Vorhabens die Vorgehensvariante 1 gewählt worden.

(d) *Vorgehensweise bei der Durchführung hydraulisch-mechanisch gekoppelter Simulationen mittels des FTK-Simulators im Rahmen dieses Vorhabens*

(d 1) *Grundsätzlicher Unterschied zwischen den Vorgehensweisen bei der Durchführung hydraulisch-mechanisch gekoppelter Simulationen mit dem FTK-Simulator und mit dem Simulator FLAC^{3D}*

Wie im vorangehenden Abschnitt erläutert worden ist, ist eine Erhöhung des aufgrund der für das Gebirgsmodell angenommenen Permeabilitäten und aufgrund des kleinsten im Modell vorliegenden Abstandes zweier benachbarter Zonenmittelpunkte festgelegten hydraulischen Zeitschritts Δt_h für den Fall einer Abnahme der hydraulischen Aktivität bei der Verwendung



des Simulators FLAC^{3D} zur Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen nicht möglich. Allerdings stellt der Simulator FLAC^{3D} die Möglichkeit zur Verfügung, die Berechnung dadurch zu beschleunigen, dass in Abhängigkeit von der mechanischen Balanciertheit des Systems mehrere hydraulische Berechnungsschritte direkt hintereinander und somit ohne zwischenzeitliche mechanische Balancierung des Systems durchgeführt werden (Vorgehensvariante 2). Durch die Möglichkeit, mehrere hydraulische Zeitschritte aneinander zu reihen, wächst bei zunehmender mechanischer Balanciertheit des Systems der zwischen zwei mechanischen Berechnungsschritten vom Simulator FLAC^{3D} simulierte hydraulische Zeitraum an.

Grundsätzlich ähnlich verhält es sich bei der Anwendung des FTK-Simulators. Bei der Durchführung einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulation mit dem FTK-Simulator wird die Simulation des Strömungsprozesses mit dem Simulator TOUGH2 durchgeführt, während die mechanische Ausbalancierung des Systems unter Anwendung des Simulators FLAC^{3D} erfolgt. Sinkt bei einer mittels des FTK-Simulators durchgeführten hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulation die mechanische Unbalanciertheit des Systems unter einen zuvor festgelegten Grenzwert, wird für den auf die mechanische Ausbalancierung mittels FLAC^{3D} folgenden TOUGH2-Aufruf der zu simulierende hydraulische Zeitraum um einen ebenfalls im Vorfeld der Berechnung zu definierenden Faktor erhöht. Trotz der festzustellenden grundsätzlichen Ähnlichkeit in Bezug auf die Vorgehensweise bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen zwischen den beiden Simulatoren stellt der FTK-Simulator aufgrund der Tatsache, dass bei der Anwendung des FTK-Simulators nicht wie bei der Anwendung des Simulators FLAC^{3D} mehrere gleichbleibende hydraulische Zeitschritte unmittelbar nacheinander durchgeführt werden können, sondern, dass der pro TOUGH2-Aufruf zu simulierende Zeitraum während der Berechnungsdurchführung im Idealfall exponentiell anwachsen kann, das zur numerischen Simulation von geomechanischen Systemen mit im Berechnungsverlauf abnehmender hydraulischer Aktivität deutlich leistungstärkere Instrumentarium dar. In Bezug auf die Steuerung des hydraulischen Zeitschritts innerhalb des Simulators FLAC^{3D} bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulationen ist somit im Rahmen der Erstellung des vorliegenden Berichts Entwicklungsbedarf identifiziert worden.

Zur Festlegung des während der Durchführung einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulation von TOUGH2 pro Aufruf simulierten hydraulischen Zeitraums in



Abhängigkeit von der Balanciertheit des Systems sind insgesamt drei Parameter erforderlich. Diese drei Parameter sind der hydraulische Startzeitschritt, die mechanische Balanciertheit und der Steigerungsfaktor für den hydraulischen Zeitschritt.

Anmerkung: Der während der Durchführung einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulation von dem Simulator TOUGH2 pro Aufruf realisierte hydraulische Zeitraum wird nachfolgend vereinfachend kurz als hydraulischer Zeitschritt bezeichnet. Die Vereinfachung der Bezeichnung erfolgt in Analogie zur Bezeichnung im Simulator FLAC^{3D}, bei dessen alleiniger Verwendung ohne die Kopplung an den Simulator TOUGH2 innerhalb eines hydraulischen Berechnungsschrittes stets die sich für den Zeitrahmen von einem hydraulischen Zeitschritt ergebenden hydraulischen Veränderungen im System berechnet werden. Der von hier an vereinfachend kurz als hydraulischer Zeitschritt bezeichnete, während der Durchführung einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulation von TOUGH2 pro Aufruf simulierte hydraulische Zeitraum ist nicht mit dem hier nicht behandelten TOUGH2-internen hydraulischen Zeitschritt zu verwechseln. Zur Erläuterung der Steuerung des TOUGH2-internen hydraulischen Zeitschritts muss hier auf Pruess et al. (1999/2012) verwiesen werden.

Die hier beschriebene Vorgehensweise mit den drei zur Zeitschrittsteuerung relevanten Parametern ist für alle in den nachfolgenden Abschnitten beschriebenen numerischen Simulationsarbeiten zum Einsatz gekommen.

(d 2) Hydraulischer Startzeitschritt

Zunächst ist für die Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen mit dem FTK-Simulator ein **hydraulischer Startzeitschritt** festzulegen. Zur Festlegung des Startwertes für den hydraulischen Zeitschritt hat im Rahmen der durchgeführten Berechnungen eine Orientierung an dem von FLAC^{3D} für das verwendete Berechnungsmodell in Abhängigkeit von der Feinheit der Diskretisierung und von der vorgegebenen Gebirgspermeabilität berechneten hydraulischen Zeitschritt stattgefunden. Der vom Simulator FLAC^{3D} über den gesamten Berechnungszeitraum verwendete hydraulische Zeitschritt ist somit für die Berechnungen mittels des FTK-Simulators als hydraulischer Startzeitschritt festgelegt worden. Grundsätzlich hätte auch die Möglichkeit bestanden, die mit dem FTK-Simulator durchgeführten Berechnungen mit einem deutlich größeren hydraulischen Startzeitschritt zu beginnen, woraus eine weitere Erhöhung der Berechnungsgeschwindigkeit resultiert hätte. Durch die



Verwendung identischer hydraulischer Startzeitschritte ist der Versuch unternommen worden, ein möglichst großes Maß an Vergleichbarkeit bezüglich der rechnerischen Präzision bei der Simulation der hydraulischen Prozesse mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren insbesondere in der Phase der starken hydraulischen Aktivität zu Beginn der Simulationszeiträume herzustellen.

(d 3) *Mechanische Balanciertheit*

Über die Festlegung des hydraulischen Startzeitschrittes hinaus ist es erforderlich, ein Kriterium festzulegen, anhand dessen bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen mittels des FTK-Simulators der hydraulische Zeitschritt automatisch programmintern gesteigert werden kann. Wie vorangehend bereits beschrieben, ist für die nachfolgend vorgestellten, im Rahmen dieses Vorhabens mit dem FTK-Simulator durchgeführten numerischen Simulationen der **Grad der mechanischen Balanciertheit** des Systems als Kriterium zur Steigerung des hydraulischen Zeitschritts verwendet worden. Zur Definition der für eine Zeitschrittsteigerung erforderlichen mechanischen Balanciertheit des Systems ist der FLAC^{3D}-Parameter **mechanical ratio** für alle nachfolgend vorgestellten numerischen Berechnungen mit dem FTK-Simulator auf einen Zahlenwert von $\text{mech_ratio} = 10^{-3}$ gesetzt worden. In den Programmablauf der Berechnungen mit dem FTK-Simulator ist das Kriterium zur mechanischen Balanciertheit derart implementiert worden, dass nach jedem TOUGH2-Aufruf zunächst 10 Berechnungsschritte zur mechanischen Balancierung des Systems durchgeführt worden sind. Im Anschluss an die 10 durchgeführten Berechnungsschritte ist die aktuell im System vorherrschende mechanische Unbalanciertheit mit dem zur Charakterisierung einer als hinreichend angesehenen Balanciertheit festgelegten Zahlenwert verglichen worden. Ist nach den ersten 10 Schritten die geforderte Balanciertheit an jeder Stelle des Systems erreicht, ist der hydraulische Zeitschritt erhöht worden, bevor im direkten Anschluss dann der Simulator TOUGH2 zur Fortsetzung der Simulation der hydraulischen Strömungsprozesse aufgerufen worden ist. Für den Fall, dass nach den ersten 10 Schritten zur mechanischen Balancierung die geforderte Genauigkeit zur mechanischen Balanciertheit im System noch nicht vorgelegen hat, ist die mechanische Balancierung so lange fortgeführt worden, bis der durch den Zahlenwert von $\text{mech_ratio} = 10^{-3}$ definierte Grad der mechanischen Balanciertheit im System erreicht ist, bevor der Simulator TOUGH2 dann zur Weiterführung der hydraulischen Simulation ohne eine Steigerung des hydraulischen Zeitschrittes aufgerufen worden ist.

(d 4) *Steigerungsfaktor für den hydraulischen Zeitschritt*

Der dritte der zur Steuerung des hydraulischen Zeitschrittes festzulegenden Parameter ist der **Steigerungsfaktor F_{St}** , um den der hydraulische Zeitschritt beim Vorliegen einer hinreichenden mechanischen Balanciertheit gesteigert wird. Der Steigerungsfaktor ist für die Berechnungen mit den drei in Bezug auf ihre Zonenanzahl kleineren Berechnungsmodellen in Abhängigkeit von der durchgeführten Berechnung so gewählt worden, dass bei hinreichend großer Berechnungsgeschwindigkeit möglichst präzise an die FLAC^{3D}-Ergebnisse angenäherte Berechnungsergebnisse erzielt werden konnten. Für die Berechnungen mit dem Bohrloch-Streckenmodell hat diese Möglichkeit nicht bestanden, sodass für das komplexeste der vier Modelle der Zahlenwert für den Steigerungsfaktor F_{St} auf Basis der zuvor mittels der Simulationen mit den Berechnungsmodellen mit kleineren Zonenanzahlen erlangten Erfahrungen sinnvoll abgeschätzt werden musste.

Tabelle 6.6 zeigt abschließend eine Übersicht über die in den nachfolgend vorgestellten Berechnungen angewendeten Parameter zur Steuerung des hydraulischen Zeitschritts.

	2D-Bohrlochmodell	3D-Bohrlochmodell	Streckenmodell	Bohrloch-Streckenmodell
Startzeitschritt Δt_{h_st}	0,1s	0,1s	14s	0,1s
Zeitschrittsteigerungskrit. mech_ratio	10^{-3}	10^{-3}	10^{-3}	10^{-3}
Zeitschrittsteigerungsfaktor F_{St}	1,001 - 4,0	1,02	1,005	1,001

Tabelle 6.6: Zusammenstellung der Parameter zur Steuerung des hydraulischen Zeitschritts für die Berechnungen mit dem FTK-Simulator für die vier im Rahmen dieses Vorhabens verwendeten Berechnungsmodelle

Aus der Orientierung an den vom Simulator FLAC^{3D} programmintern festgelegten Zeitschritten haben für die drei Berechnungsmodelle mit den filigranen Bohrlochstrukturen Startzeitschritte von $\Delta t_{h_st} = 0,1$ s resultiert. Lediglich für das deutlich gröber diskretisierte Streckenmodell konnte der Startzeitschritt auf einen erheblich größeren Zahlenwert von $\Delta t_{h_st} = 14$ s gesetzt werden. Zu den der Zeile 1 in Tabelle 6.6 zu entnehmenden Zahlenwerten ist anzumerken, dass die von FLAC^{3D} programmintern festgelegten hydraulischen Zeitschritte nicht identisch als hydraulische Startzeitschritte für die Berechnungen mit dem FTK-Simulator ü-



bernommen worden sind. Vielmehr sind sie vereinfachend auf die erste Nachkommastelle (Modelle mit Bohrlochdiskretisierung) bzw. auf die erste Vorkommastelle (Streckenmodell) abgerundet worden.

Weiterhin ist Tabelle 6.6 zu entnehmen, dass für alle durchgeführten Berechnungen eine durch den Zahlenwert des mechanical ratios von $\text{mech_ratio} = 10^{-3}$ gesteuerte mechanische Balanciertheit des Systems als hinreichend zu erachten gewesen ist. Während die Wahl von geringeren Zahlenwerten für das mechanical ratio zu unnötig erhöhten Berechnungszeiten ohne signifikanten Zugewinn in Bezug auf die Qualität der Ergebnisse führt, folgen aus der Wahl von höheren Zahlenwerten des mechanical ratios signifikante und somit nicht akzeptable Ungenauigkeiten in Bezug auf die berechneten Zustandsgrößen.

Der Betrachtung der letzten Zeile von Tabelle 6.6 kann entnommen werden, dass die Zeitschrittsteigerungsfaktoren für das quasi-zweidimensionale Bohrlochmodell zwischen Zahlenwerten von $F_{St} = 1,001$ und $F_{St} = 4,0$ variiert worden sind. Auf Basis der mit dem quasi-zweidimensionalen Bohrlochmodell gewonnenen Erfahrungen ist anschließend der Zeitschrittsteigerungsfaktor für das dreidimensionale Bohrlochmodell auf einen Zahlenwert von $F_{St} = 1,02$ festgelegt worden. Für das Streckenmodell hat sich ein Zeitschrittsteigerungsfaktor von $F_{St} = 1,005$ als geeignet zur Annäherung an die vom Simulator FLAC^{3D} berechneten Ergebnisse erwiesen.

Insgesamt lassen die an den drei kleineren Modellen durchgeführten Berechnungen erkennen, dass die Anwendung von kleineren Zeitschrittsteigerungsfaktoren zwar zu längeren Berechnungszeiten führt, aber im Gegenzug dafür bei der Verwendung kleinerer Zeitschrittsteigerungsfaktoren auch die besser an die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Resultate angehöhten Ergebnisse erreicht werden. Da für die Berechnungen mit dem dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodell keine Möglichkeit zur Überprüfung der berechneten Zustandsgrößen durch einen Ergebnisvergleich mit den mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Ergebnissen bestanden hat, ist für die numerischen Simulationen mit dem dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodell der Zeitschrittsteigerungsfaktor konservativ auf einen vergleichsweise niedrigen Zahlenwert von $F_{St} = 1,001$ festgelegt worden.



6.4.3.5 Numerische Simulationen mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs

(a) Grundsätzliche Anmerkungen

Im vorliegenden Abschnitt werden die Simulationsergebnisse, die mit dem Simulator FLAC^{3D} und mittels des FTK-Simulators für das in Abschnitt 6.4.3.1 in Bild 6.74 dargestellte quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs generiert worden sind, vorgestellt und miteinander verglichen.

Im vorangehenden Abschnitt 6.4.3.4 ist die Signifikanz des für die Durchführung der Berechnungen mit dem FTK-Simulator gewählten Zeitschrittsteigerungsfaktors F_{St} erläutert worden. Aufgrund der identifizierten Relevanz des Zeitschrittsteigerungsfaktors in Bezug auf die benötigten Berechnungszeiten einerseits so wie auf die Qualität der Berechnungsergebnisse andererseits sind mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs zunächst Variationsberechnungen zum Einfluss des Zeitschrittsteigerungsfaktors durchgeführt worden, bevor im Anschluss der Ergebnisvergleich mit den mit dem Simulator FLAC^{3D} für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs generierten Simulationsergebnissen durchgeführt worden ist. Die Simulationsergebnisse der Variationsberechnungen zum Einfluss des Zeitschrittsteigerungsfaktors werden nachfolgend in Abschnitt 6.4.3.5(b) vorgestellt.

Unabhängig davon, ob zur Durchführung von numerischen Simulationen der Simulator FLAC^{3D} oder der FTK-Simulator verwendet wird, hat die Feinheit der bei der Modellerstellung vorgenommenen Diskretisierung einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf die im Rahmen der numerischen Simulationen berechneten Zustandsgrößen. Die Differenzen in Bezug auf die Simulationsergebnisse, die durch die Variation der Modelldiskretisierung hervorgerufen werden, sind für die Berechnungen mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs anhand der Durchführung einer Vergleichsberechnung, die unter Verwendung einer modifizierten Modelldiskretisierung durchgeführt worden ist, untersucht worden. Im Rahmen dieses Vorhabens ist insbesondere der Diskretisierungseinfluss auf die berechneten Zustandsgrößen unmittelbar an der Bohrlochkontur untersucht worden, da im unmittelbaren Hohlraumkonturbereich die betragsmäßig größten Änderungen der Zustandsgrößen zu erwarten sind und da diskretisierungsbedingte Abweichungen zwischen den berechneten Zustandsgrößen im Bereich der Hohlraumkontur am ehesten zu Fehlprognosen in Bezug auf das Tragverhalten des betrachteten untertägigen Tragwerks führen

können. Die Simulationsergebnisse der für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs mit der modifizierten Diskretisierung durchgeführten numerischen Simulation werden in Abschnitt 6.4.3.5(c) vorgestellt.

Nachdem in den Abschnitten 6.4.3.5(b) und 6.4.3.5(c) zunächst die Simulationsergebnisse von Variationsberechnungen mit dem FTK-Simulator zum Zeitschritteinfluss und zum Diskretisierungseinfluss dargestellt werden, beginnt in Abschnitt 6.4.3.5(d) die eigentliche Gegenüberstellung von Berechnungsergebnissen, die mittels des FTK-Simulators und mit dem Simulator FLAC^{3D} generiert worden sind. Zunächst wird unter 6.4.3.5(d1) die mittels des FTK-Simulators berechnete stationäre Porenwasserdruckverteilung mit der mit dem Simulator FLAC^{3D} für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Modell eines Bohrlochs generierten stationären Porenwasserdruckverteilung verglichen.

Es ist bereits an dieser Stelle vorwegzunehmen, dass während des Vergleichs der mit den beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Porenwasserdruckverteilungen ein signifikanter Unterschied in Bezug auf das Erscheinungsbild der ermittelten sekundären hydraulischen Potenzialfelder identifiziert worden ist. Um die Ursache für die identifizierten Unterschiede bezüglich der berechneten sekundären hydraulischen Potenzialfelder zu ermitteln, ist die Durchführung von weiteren Berechnungsvariationen erforderlich gewesen. Einige ausgewählte Simulationsergebnisse der weiteren erforderlichen Berechnungsvariationen, bei denen nicht der FTK-Simulator verwendet worden ist, sondern ausschließlich die beiden nicht gekoppelten Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2 zur Durchführung von rein hydraulischen numerischen Simulationen eingesetzt worden sind, sind daher zunächst unter Punkt 6.4.3.5(d2) zu betrachten, bevor unter den Punkten 6.4.3.5(d3) bis 6.4.3.5(d6) die Ergebnisdifferenzen in Bezug auf die mittels des FTK-Simulators und mit dem Simulator FLAC^{3D} für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs generierten Spannungszustände, Matrixausnutzungsgrade, Radialverschiebungen des Hohlraumrandes und Volumenverzerrungen analysiert werden.

(b) *Einfluss der Zeitschrittsteuerung auf die Berechnungsergebnisse bei der Anwendung des FTK-Simulators*

Die zeitbezogen ermittelte Fluidbilanz für ein numerisches Gebirgsmodell stellt die Differenz zwischen dem hydraulischen Gesamtvolumen, das das Gebirgsmodell im Verlauf der Berechnung durch die Hohlraumkontur verlässt, und dem hydraulischen Gesamtvolumen, das dem

Gebirgsmodell an den Modellrändern im Verlauf der Berechnung zutritt, dar. Die Fluidbilanz charakterisiert den transienten Strömungsprozess. Bei Erreichen des stationären Zustandes darf sich die Fluidbilanz nicht mehr ändern (Zufluss = Ausfluss).

In Bild 6.80 ist die zeitabhängige Entwicklung unterschiedlicher Fluidbilanzen für hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnungen, die mit dem FTK-Simulator durchgeführt worden sind, dargestellt. Darüber hinaus enthält das in Bild 6.80 dargestellte Diagramm die Fluidbilanz für eine mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ durchgeführte hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnung sowie eine weitere Fluidbilanz für eine rein hydraulische, mit dem Simulator TOUGH2 durchgeführte Berechnung.

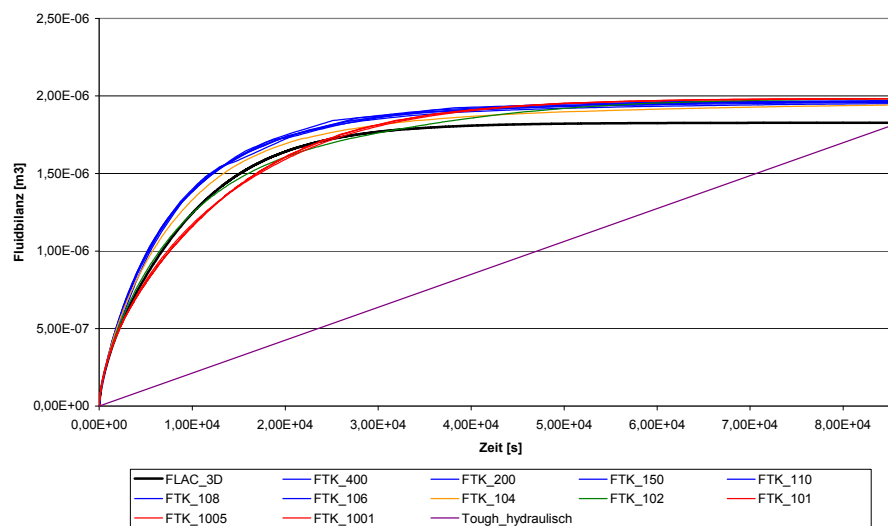


Bild 6.80: Fluidbilanzen für hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnungen bis zum Erreichen des stationären Zustandes mit dem FTK-Simulator (rote Graphenschar, blaue Graphenschar, grüner und orangefarbener Graph) sowie eine hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnung mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (schwarzer Graph) und eine rein hydraulische Berechnung mit TOUGH2 (linear verlaufender violetter Graph)

Der Betrachtung der x-Achse des in Bild 6.80 dargestellten Diagramms kann entnommen werden, dass mittels der durchgeführten Berechnungen ein Zeitraum von $t = 86000$ s und somit ein Zeitraum von genau einem Tag simuliert worden ist. Alle dargestellten Zahlenwertegraphen, mit Ausnahme des violetten Zahlenwertegraphen, nehmen innerhalb des Berechnungszeitraumes einen praktisch horizontalen Verlauf an. Der horizontale Verlauf der dargestellten Zahlenwertegraphen lässt sich dahingehend interpretieren, dass gegen Ende des dargestellten Berechnungszeitraumes für keine der untersuchten Berechnungsvariationen eine Änderung der Fluidbilanz stattgefunden hat.

Ändert sich ab einem bestimmten Simulationszeitpunkt einer numerischen Berechnung die Fluidbilanz nicht mehr, so lässt sich daraus schlussfolgern, dass von diesem Zeitpunkt an das aus dem Modell herausströmende Flüssigkeitsvolumen dem dem Modell zuströmenden Flüssigkeitsvolumen entspricht. Für den Fall der hier mittels des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs simulierten Einphasenströmung in der Umgebung eines radialsymmetrischen Hohlraums ist aus der Tatsache, dass zu- und abströmendes hydraulisches Volumen sich entsprechen, zu schließen, dass der stationäre Strömungszustand in dem das Bohrloch umgebenden Gebirge erreicht ist und auch bei einer beliebig langen Fortsetzung der numerischen Berechnung keine weitere Veränderung der Porenwasserdruckverteilung mehr zu erwarten ist. Der horizontale Verlauf aller Zahlenwertegraphen der Fluidbilanzen zu den hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen kann somit als Bestätigung dafür gewertet werden, dass es hinreichend gewesen ist, für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs einen hydraulischen Zeitraum von $t = 24$ h zu simulieren, um den stationären hydraulischen Zustand zu erreichen.

Die zeitabhängige Entwicklung der Fluidbilanz für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnung mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ ist in Bild 6.80 anhand des schwarzen Zahlenwertegraphen dargestellt. Die Gesamtfluidbilanz nach dem Erreichen des stationären Zustands hat für die mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ durchgeführte Berechnung $\Delta Vol \approx 1,86 \text{ cm}^3$ betragen. Zur Identifizierung von gegebenenfalls auftretenden Differenzen bezüglich der hydraulischen Resultate zwischen den Simulatoren $FLAC^{3D}$ und TOUGH2 ist zunächst eine Vergleichsberechnung mit dem Simulator TOUGH2 vorgenommen worden. Die für die rein hydraulische Berechnung mit dem Simulator TOUGH2 ermittelte Gesamtfluidbilanz kann der Betrachtung des Endwertes des linear verlaufenden violetten Zahlenwertegraphen in Bild 6.80 entnommen werden. Die mit dem Simulator TOUGH2 berechnete Fluidbilanz entspricht demnach ebenfalls $\Delta Vol \approx 1,86 \text{ cm}^3$. Dem linearen Verlauf des violetten Zahlenwertegraphen für die mit dem Simulator TOUGH2 berechnete Fluidbilanz ist keine Bedeutung beizumessen. Der lineare Verlauf resultiert ausschließlich aus der Tatsache, dass während der Durchführung der Berechnung mit dem Simulator TOUGH2 keine Möglichkeit bestanden hat, Zwischenresultate aufzuzeichnen, sodass in dem violetten Zahlenwertegraphen lediglich der Start- und der Endwert der Berechnung mit dem Simulator TOUGH2 dargestellt sind.

Der vergleichenden Betrachtung der Endwerte des schwarzen Zahlenwertegraphen und des violetten Zahlenwertegraphen in dem in Bild 6.80 dargestellten Diagramm kann damit eine

präzise Übereinstimmung der Fluidbilanzen für die Berechnungen mit den Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2 entnommen werden.

Die weiteren 11 im Diagramm in Bild 6.80 zu betrachtenden Zahlenwertegraphen visualisieren, wie vorangehend bereits erwähnt worden ist, die Fluidbilanzen von Berechnungsvariationen, die mittels des FTK-Simulators vorgenommen worden sind. Die 11 Berechnungsvariationen sind durchgeführt worden, um den Einfluss des verwendeten Zeitschrittsteigerungsfaktors auf die vom FTK-Simulator generierten Simulationsergebnisse zu untersuchen. Zur Untersuchung des Einflusses des Zeitschrittsteigerungsfaktors auf die Simulationsergebnisse ist der Zeitschrittsteigerungsfaktor bei der Durchführung der 11 Berechnungen zwischen Zahlenwerten von $1,001 \leq F_{St} \leq 4,0$ variiert worden.

Ziel der durchgeführten Variationsberechnungen ist es gewesen, eine möglichst genaue Übereinstimmung der mit dem Simulator FLAC^{3D} und der mittels des FTK-Simulators berechneten Fluidbilanzen zu erreichen. Dabei ist nicht nur der am Ende der Berechnung nach $t = 24$ h erreichte Zahlenwert der Fluidbilanzen maßgeblich gewesen, sondern auch die durch den Verlauf der dargestellten Zahlenwertegraphen charakterisierte zeitliche Entwicklung der Fluidbilanzen.

Der Betrachtung des Diagramms in Bild 6.80 ist zunächst zu entnehmen, dass die Fluidbilanzen sich bezüglich ihrer am Ende des Berechnungszeitraumes angenommenen Zahlenwerte nur geringfügig voneinander unterscheiden. Alle 11 dargestellten Zahlenwertegraphen nehmen einen Endwert von in etwa $\Delta Vol \approx 1,95 \text{ cm}^3$ an. Für keine der durchgeführten Variationsberechnungen wird somit eine präzise Annäherung an den von den Simulatoren TOUGH2 und FLAC^{3D} berechneten Zahlenwert von $\Delta Vol \approx 1,86 \text{ cm}^3$ erreicht. Vielmehr beträgt die Abweichung zwischen den vom FTK-Simulator berechneten Fluidbilanzen und der vom Simulator FLAC^{3D} berechneten Fluidbilanz nahezu unabhängig von der Wahl des Zeitschrittsteigerungsfaktors $\Delta_{\Delta Vol} \approx 4,8 \%$.

Der Vergleich der vom Simulator FLAC^{3D} berechneten Fluidbilanz mit den vom FTK-Simulator berechneten Fluidbilanzen zeigt einerseits, dass ein gewisses Maß an Abweichungen zwischen den Fluidbilanzen im Bereich von $\Delta_{\Delta Vol} \leq 5,0 \%$ für die Berechnungen mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs offensichtlich unabhängig von der Zeitschrittsteuerung auftritt. Andererseits lässt sich als positive Erkenntnis aus den in Bild 6.80 dargestellten Simulationsergebnissen eine gewisse Robustheit der

mittels des FTK-Simulators generierten Berechnungsergebnisse gegenüber der gewählten Zeitschrittsteuerung feststellen.

Obwohl alle 11 für die Variationsberechnungen mit dem FTK-Simulator dargestellten Zahlenwertgraphen einen nahezu identischen Endwert aufweisen, lassen sich bezüglich der zeitabhängigen Entwicklungen der Fluidbilanzen bei der Betrachtung von Bild 6.80 geringfügige Unterschiede zwischen den einzelnen Berechnungsvariationen identifizieren. So lässt sich ein Großteil der 11 dargestellten Zahlenwertgraphen in zwei Graphenscharen einteilen. Die eine der Graphenscharen ist in Bild 6.80 in der Farbe rot dargestellt. Sie beinhaltet die drei Fluidbilanzgraphen für die Berechnungsvariationen mit den Zeitschrittsteigerungsfaktoren mit Zahlenwerten zwischen $1,001 \leq F_{St} \leq 1,01$. Die zweite Graphenschar beinhaltet die sechs in blau dargestellten Zahlenwertgraphen für die Berechnungsvariationen, bei denen der Zahlenwert des Zeitschrittsteigerungsfaktors im Bereich von $1,06 \leq F_{St} \leq 4,00$ variiert worden ist. Zwei weitere Fluidbilanzgraphen, die keiner der beiden Graphenscharen zugeordnet werden können, sind im Diagramm in Bild 6.80 in den Farben grün und orange dargestellt. Bei den beiden Zahlenwertgraphen handelt es sich um die Fluidbilanzgraphen für die Berechnungsvariationen mit Zeitschrittsteigerungsfaktoren von $F_{St} = 1,02$ und $F_{St} = 1,04$. Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Fluidbilanzgraphen der Berechnungsvariationen mit Zeitschrittsteigerungsfaktoren mit Zahlenwerten von $F_{St} \leq 1,01$ ähnliche zeitabhängige Entwicklungen der Fluidbilanzen repräsentieren und somit der roten Graphenschar zugeordnet werden können und Fluidbilanzgraphen für Berechnungsvariationen, bei denen die Zeitschrittsteigerungsfaktoren Zahlenwerte von $F_{St} \geq 1,06$ betragen haben, der blauen Graphenschar zuzuordnen sind, da sie ebenfalls Fluidbilanzen abbilden, die sich in ihrer zeitabhängigen Entwicklung sehr ähnlich sind.

Um Differenzen in Bezug auf berechnete gebirgsmechanische Zustandsgrößen zu identifizieren, die neben den Differenzen bezüglich der Fluidbilanzen durch die Anwendung der unterschiedlichen Zeitschrittsteuerungsparameter hervorgerufen werden können, werden nachfolgend die beiden Berechnungsvariationen, die unter Verwendung der Zeitschrittsteigerungsfaktoren $F_{St} = 1,005$ und $F_{St} = 1,06$ durchgeführt worden sind, miteinander verglichen. Im Rahmen des durchgeführten Vergleichs sind die unter Anwendung der unterschiedlichen Zeitschrittsteigerungsfaktoren berechneten Porenwasserdruckverteilungen, Hauptspannungsverteilungen und Matrixausnutzungsgrade im stationären Zustand gegenübergestellt worden. Zur Gegenüberstellung der Zustandsgrößen sind die in Bild 6.81 bis Bild 6.84 zu betrachtenden

Flächenplots angefertigt worden. In den beiden Flächenplots ist jeweils die relative Ergebnisabweichung in Bezug auf die berechneten Zustandsgrößen für einen Ausschnitt des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs bezogen auf den unter Verwendung des Zeitschrittsteigerungsfaktor $F_{St} = 1,005$ berechneten Zahlenwert dargestellt. Zur Berechnung der in den Flächenplots in Bild 6.81 bis Bild 6.84 dargestellten relativen Abweichungen der Zustandsgrößen ist Gleichung (6.19) verwendet worden:

$$\Delta_{state} = \frac{state_1 - state_2}{state_2} \quad (6.19)$$

mit

- Δ_{state} im jeweiligen Flächenplot dargestellte relative Zustandsgrößenabweichung,
- $state_1$ mit Zeitschrittsteigerungsfaktor $F_{St} = 1,06$ berechnete Zustandsgröße,
- $state_2$ mit Zeitschrittsteigerungsfaktor $F_{St} = 1,005$ berechnete Zustandsgröße.

Aus Bild 6.81 ist die relative Ergebnisabweichung bezüglich der ermittelten Porenwasserdrücke zu ersehen. Bild 6.82 und Bild 6.83 zeigen die in Bezug auf die im System vorherrschenden Hauptspannungen berechneten relativen Ergebnisabweichungen, bevor in Bild 6.84 die aus den drei zuvor betrachteten Zustandsgrößen resultierenden relativen Ergebnisabweichungen zwischen den unter Verwendung der zwei unterschiedlichen Zeitschrittsteigerungsfaktoren ermittelten Matrixausnutzungsgrade vorgestellt werden.

Den Darstellungen der relativen Ergebnisabweichungen in den Flächenplots in Bild 6.81 bis Bild 6.84 kann neben der räumlichen Verteilung der relativen Differenzen zwischen den berechneten Zustandsgrößen darüber hinaus auch die Bandbreite der relativen Ergebnisabweichungen für jede der betrachteten Zustandsgrößen entnommen werden. Die Minimal- und Maximalwerte der relativen Ergebnisabweichungen für die vier betrachteten Zustandsgrößen werden in Tabelle 6.7 zusammengefasst.

Die Betrachtung von Tabelle 6.7 lässt erkennen, dass beinahe alle Beträge der zeitschrittsteuerungsbedingten Ergebnisdifferenzen in den Bereich von $|\Delta_{rel}| \leq 1\%$ einzuordnen sind. Die Bandbreite der aus den ersten drei berechneten Zustandsgrößen abgeleiteten Matrixausnutzungsgrade überschreitet mit Zahlenwerten von $|\Delta_{m_rel}| \leq 1,4\%$ den Betragswert von $|\Delta_{rel}| = 1\%$ nur leicht. Eine deutlich höhere relative Ergebnisabweichung ergibt sich mit einem Betragswert von $|\Delta_{PW_{m_rel}}| \leq 4,1\%$ ausschließlich für die berechneten Porenwasserdrü-

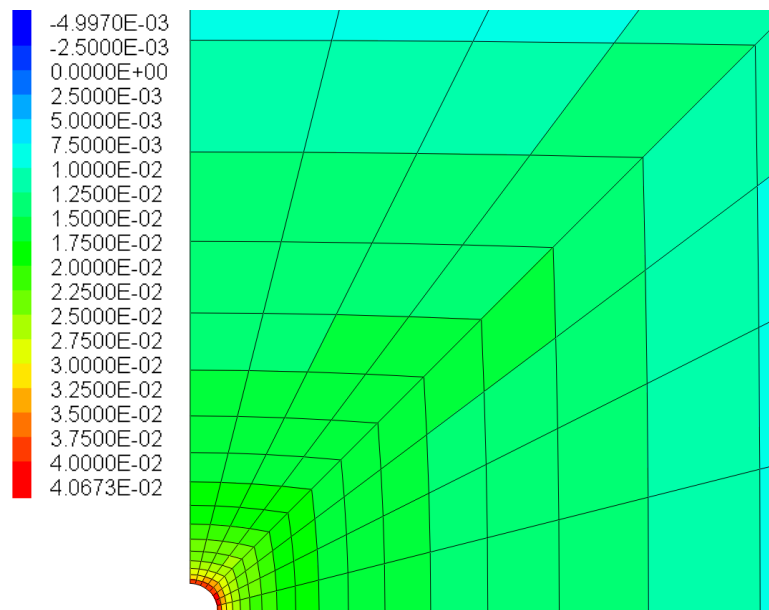


Bild 6.81: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem FTK-Simulator mit den Zeitschrittsteigerungsfaktoren $F_{St} = 1,005$ und $F_{St} = 1,06$ für den stationären Zustand berechneten Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen der Porenwasserdrücke bezogen auf den mit einem Zeitschrittsteigerungsfaktor von $F_{St} = 1,005$ berechneten Zahlenwert an.

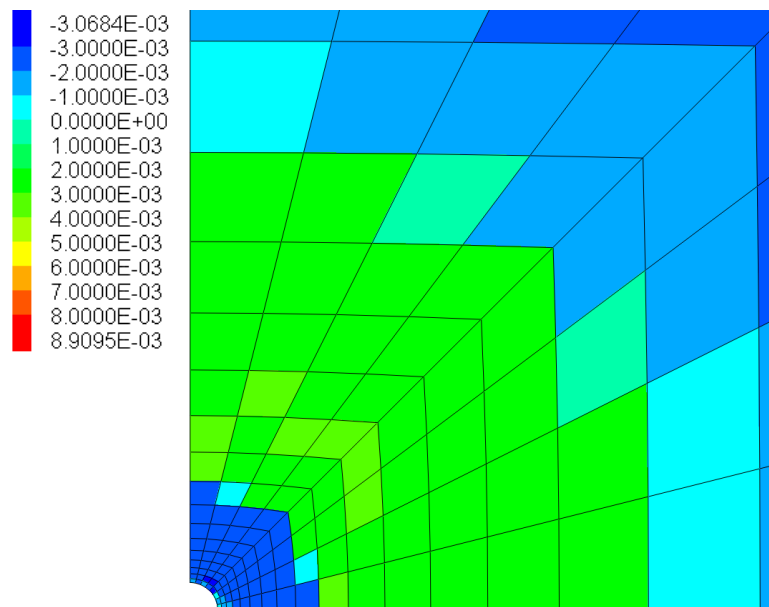


Bild 6.82: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem FTK-Simulator mit den Zeitschrittsteigerungsfaktoren $F_{St} = 1,005$ und $F_{St} = 1,06$ für den stationären Zustand berechneten Minimalspannungsverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen der Minimalspannungen bezogen auf den mit einem Zeitschrittsteigerungsfaktor von $F_{St} = 1,005$ berechneten Zahlenwert an.

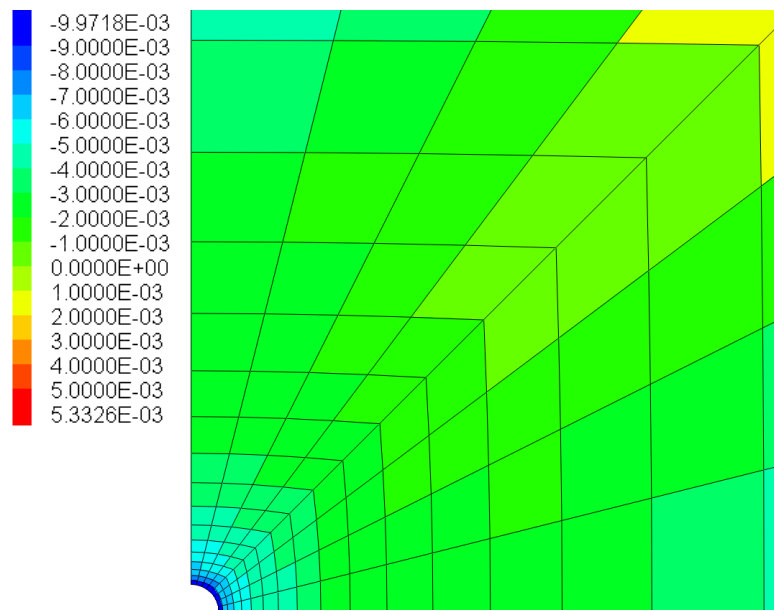


Bild 6.83: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem FTK-Simulator mit den Zeitschrittsteigerungsfaktoren $F_{St} = 1,005$ und $F_{St} = 1,06$ für den stationären Zustand berechneten Maximalspannungsverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen der Maximalspannungen bezogen auf den mit einem Zeitschrittsteigerungsfaktor von $F_{St} = 1,005$ berechneten Zahlenwert an.

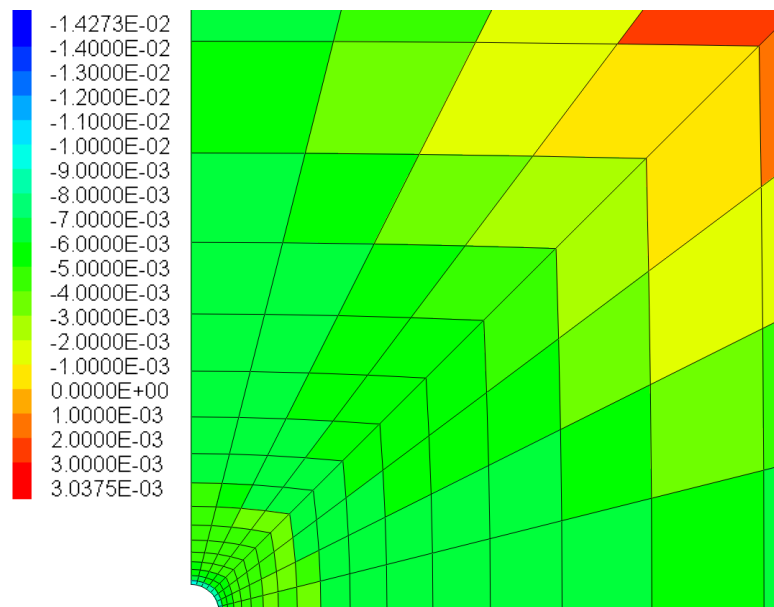


Bild 6.84: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem FTK-Simulator mit den Zeitschrittsteigerungsfaktoren $F_{St} = 1,005$ und $F_{St} = 1,06$ für den stationären Zustand berechneten Matrixausnutzungsgraden – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen der Matrixausnutzungsgrade bezogen auf den mit einem Zeitschrittsteigerungsfaktor von $F_{St} = 1,005$ berechneten Zahlenwert an.

	ΔPW_{rel}	$\Delta \sigma_{min_rel}$	$\Delta \sigma_{max_rel}$	$\Delta \eta_{m_rel}$
Δ_{min}	$-0,5 \times 10^{-2}$	$-0,3 \times 10^{-2}$	$-1,0 \times 10^{-2}$	$-1,4 \times 10^{-2}$
Δ_{max}	$4,1 \times 10^{-2}$	$0,9 \times 10^{-2}$	$0,5 \times 10^{-2}$	$0,3 \times 10^{-2}$

Tabelle 6.7: Maximale und minimale relative Ergebnisabweichungen aufgrund von Variationen der Zeitschrittsteuerung bei den Berechnungen mit dem FTK-Simulator für die vier Zustandsgrößen Porenwasserdruck, kleinste Hauptspannung, größte Hauptspannung und Matrixausnutzungsgrad im quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs

cke. Aus der Zuordnung der Farben zu den Zonen des Modells gemäß der zugehörigen Zahlenwerteskala dem in Bild 6.81 zu betrachtenden Flächenplot kann entnommen werden, dass insbesondere in den konturnahen Gebirgsbereichen relativ große Ergebnisdifferenzen bezüglich der ermittelten Porenwasserdrücke für die zwei Variationsberechnungen vorliegen. Unmittelbar an der Kontur des Bohrlochs überschreiten die unter der Verwendung eines Zeitschrittsteigerungsfaktors von $F_{St} = 1,06$ berechneten Porenwasserdruckwerte die Porenwasserdruckwerte, die bei der Berechnungsvariation mit einem Zeitschrittsteigerungsfaktor von $F_{St} = 1,005$ generiert worden sind, prozentual um einen Zahlenwert von $\Delta PW_{m_rel} = 4,1 \%$.

Die berechneten Porenwasserdrücke erweisen sich somit im Vergleich zu den weiteren untersuchten Zustandsgrößen als besonders sensibel gegenüber Variationen der Zeitschrittsteuerung. Insgesamt kann bezüglich der durch die Zeitschrittvariationen hervorgerufenen Ergebnisdifferenzen für die untersuchten Zustandsgrößen festgehalten werden, dass zumindest für die Berechnungen mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs eine große Robustheit des FTK-Simulators gegenüber Zeitschritteinflüssen besteht, da die vorangehend beschriebenen, durch die Zeitschrittvariationen hervorgerufenen Ergebnisbandbreiten weit unterhalb der üblichen Bandbreiten liegen, die für die Durchführung von numerischen Analysen im Bereich der Gebirgsmechanik durch weitere Faktoren wie beispielsweise die Streubreiten bei der laborativen Ermittlung von Gesteinsparametern oder die Parameteranpassung bei der Übertragung von laborativ ermittelten Gesteinsparametern auf den Größenmaßstab des Gebirges zustande kommen.

Ein weiterer nicht zu vernachlässigender Faktor für eine mögliche Vergrößerung der Bandbreiten der mittels der numerischen Simulation für ein untertägiges Tragwerk generierten Zustandsgrößen ist der Einfluss der Feinheit der im Rahmen der Modellierung vorgenommenen Diskretisierung. Zur Verdeutlichung des Einflusses der zur Simulation des Tragverhaltens eines untertägigen Tragwerks vorgenommenen Modelldiskretisierung werden nachfolgend in

Abschnitt 6.4.3.5(c) die Auswirkungen einer Variation der Diskretisierung des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs auf die generierten Zustandsgrößen untersucht.

(c) *Einfluss der Feinheit der Diskretisierung entlang der Hohlraumkontur auf die Berechnungsergebnisse bei der Anwendung des FTK-Simulators*

Zur Verdeutlichung des Einflusses der Modelldiskretisierung auf die im Rahmen der numerischen Simulation für ein untertägiges Tragwerk berechneten Zustandsgrößen werden im vorliegenden Abschnitt Berechnungsergebnisse miteinander verglichen, die mittels unterschiedlich diskretisierter Modellvarianten des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs unter Verwendung des FTK-Simulators generiert worden sind. Bild 6.85 zeigt zunächst bohrlochnahe Teilbereiche der zwei zum Einsatz gekommenen Varianten des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs mit den unterschiedlichen vorgenommenen Diskretisierungen.

Beide verwendeten Modellvarianten besitzen identische Geometrien bezüglich ihrer äußeren Abmessungen sowie bezüglich der Abmessungen des modellierten Hohlraums und verfügen über die identische Anzahl von Zonen. Die Anzahl der verwendeten Zonen radial sowie auch tangential zum Hohlraum unterscheidet sich in den beiden Modellvarianten ebenfalls nicht. Der Unterschied zwischen den beiden Modellvarianten besteht ausschließlich darin, dass die in Bild 6.85(a) dargestellte Variante in der Nähe der Bohrlochkontur eher gröber und dafür an den äußeren Modellrändern feiner diskretisiert worden ist als die in Bild 6.85(b) dargestellte Modellvariation, die im Gegensatz zur Variante (a) im bohrlochnahen Gebirgsbereich eine sehr feine Diskretisierung aufweist und dafür im Bereich der Modellränder eher grob diskretisiert worden ist. Bei der in Bild 6.85(a) dargestellten Variante handelt es sich um die standardmäßig im Rahmen dieses Vorhabens für die Berechnungen mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs angewendete Modellvariante. Die Modifikation der Diskretisierung zur Erstellung der Modellvariante (b) ist anhand einer Variation des für die Unterteilung der modellierten Gebirgsbereiche in radialer Richtung verantwortlichen Parameters erfolgt.

Der für die Zuordnung der Größenverhältnisse der Zonen in radialer Richtung verwendete Parameter ist von dem für die Modellierung des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen

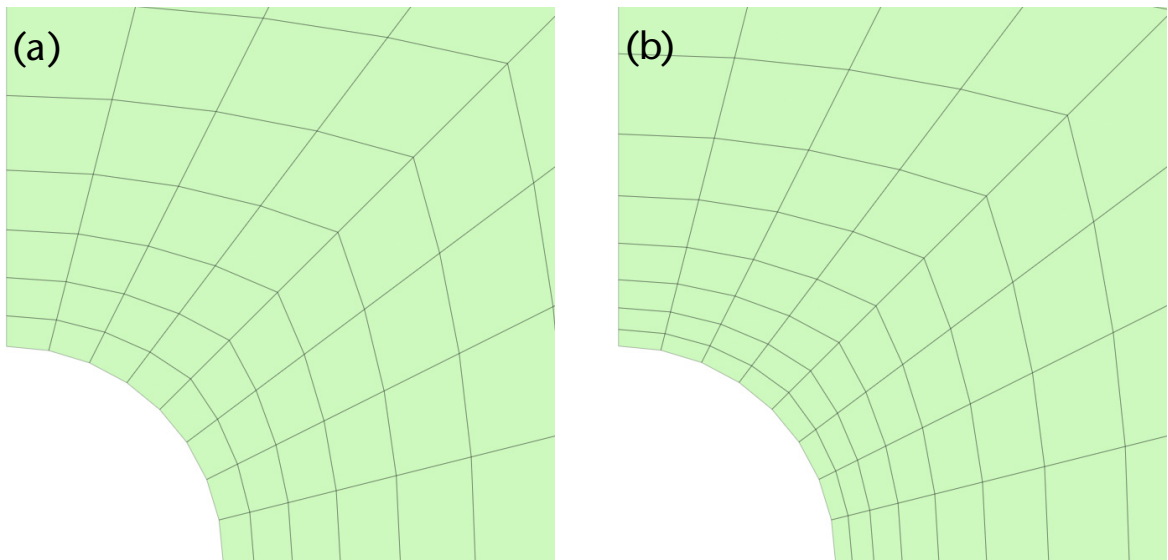


Bild 6.85: Unterschiedliche Modelldiskretisierungen zur Untersuchung des Einflusses der Feinheit der Diskretisierung an der Bohrlochkontur mit der im Rahmen dieses Vorhabens zum Einsatz gekommenen Diskretisierungsvariante mit einem gewählten Unterteilungsratio von $r_r = 1,25$ in radialer Richtung (a) und einer Vergleichsvariante mit einem bei gleicher Zonenanzahl und ansonsten identischer Diskretisierung auf $r_r = 1,3$ gesteigerten Unterteilungsratio in radialer Richtung

Berechnungsmodells eines Bohrlochs verwendeten Zahlenwert von $r_r = 1,25$ auf $r_r = 1,3$ erhöht worden. Aus der beschriebenen Erhöhung des Parameters r_r folgt, dass die Unterteilung des Modells in 20 Zonen in radialer Richtung derart erfolgt, dass die Breite für die Modellvariante (b) von einer Zone zur nächsten in radialer Richtung mit wachsendem Abstand zur Hohlraumkontur um $\Delta_B = 30\%$ anwächst anstatt wie bei der Modellvariante (a) von einer Zone zur nächsten in radialer Richtung nur um $\Delta_B = 25\%$ anzuwachsen.

Wie der Betrachtung von Bild 6.85 zu entnehmen ist, folgt aus der beschriebenen Erhöhung des Modellierungsparameters r_r eine deutlich feinere Diskretisierung entlang der Bohrlochkontur. Bei der Durchführung von numerischen Simulationen mittels des FTK-Simulators werden die relevanten Zustandsgrößen wie zum Beispiel die Porenwasserdrücke und die Hauptspannungen in den Schwerpunkten der modellierten Zonen berechnet. Eine feinere Diskretisierung im Bereich der Hohlraumkontur bedeutet daher, dass die Zustandsgrößen für einen näher an der Bohrlochkontur gelegenen Bereich berechnet werden. Hieraus resultiert eine Beeinflussung der berechneten Zustandsgrößen durch die Wahl der Diskretisierung im Hohlraumrandbereich. Der Einfluss der Diskretisierungsunterschiede zwischen den zwei in Bild 6.85 zu betrachtenden Modellierungsvarianten (a) und (b) auf die für den Hohlraumrandbe-

reich ermittelten Zustandsgrößen kann der Betrachtung des in Bild 6.86 dargestellten Diagramms entnommen werden.

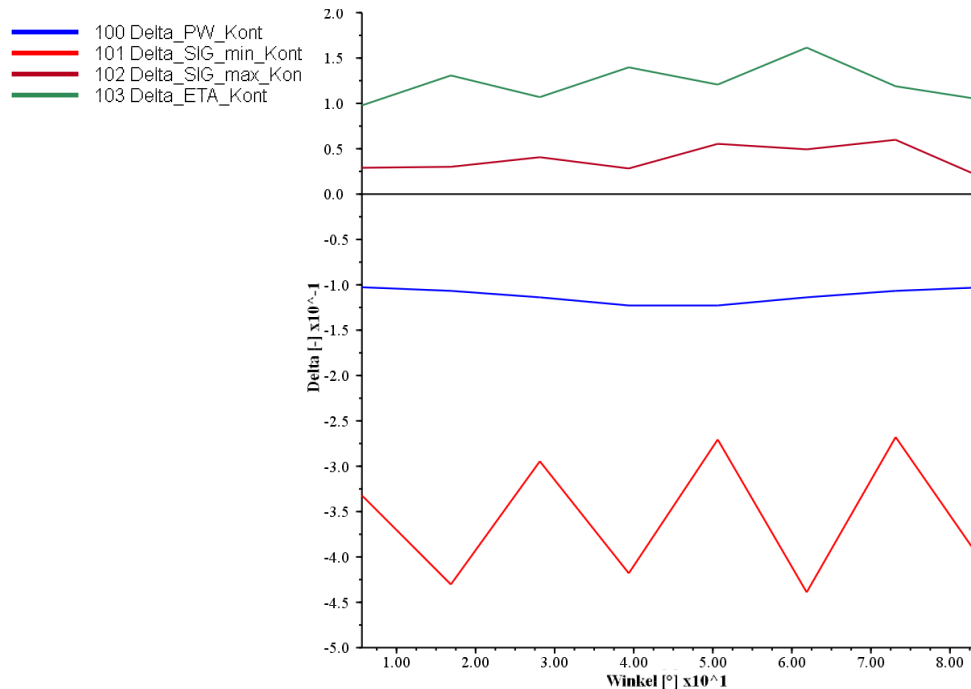


Bild 6.86: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem FTK-Simulator bei den unterschiedlichen in Bild 6.85 dargestellten Diskretisierungen für den stationären Zustand berechneten Zustandsgrößen im Konturschnitt (First bei $\varphi = 0^\circ$, Stoß bei $\varphi = 90^\circ$) – Porenwasserdruck (blauer Graph); Maximalspannung (dunkelroter Graph); Minimalspannung (hellroter Graph); Matrixausnutzungsgrade (grüner Graph). Der dargestellte Graph zeigt jeweils die Differenz der Berechnungsergebnisse bezogen auf die mit der Diskretisierungsvariante (a) aus Bild 6.85 generierten Berechnungsergebnisse.

Das in Bild 6.86 zu betrachtende Diagramm zeigt die relativen Abweichungen zwischen den mittels des FTK-Simulators mit den zwei unterschiedlichen in Bild 6.85 dargestellten Diskretisierungsvarianten (a) und (b) für den stationären Zustand berechneten Zustandsgrößen im Schnitt entlang der Bohrlochkontur. Der Konturschnitt verläuft dabei entlang der modellierten Viertelbohrlochkontur vom First bei $\varphi = 0^\circ$ zum Stoß bei $\varphi = 90^\circ$.

Zur Berechnung der in Bild 6.86 im Konturschnitt zu betrachtenden relativen Abweichungen der Zustandsgrößen ist Gleichung (6.20) verwendet worden. Gleichung (6.20) entspricht Gleichung (6.19) aus Abschnitt 6.4.3.5(b) mit nachfolgend aufgeführter, abgewandelter Bedeutung der Variablen $state_1$ und $state_2$:



$$\Delta_{state} = \frac{state_1 - state_2}{state_2} \quad (6.20)$$

mit

Δ_{state} im Konturschnitt dargestellte relative Zustandsgrößenabweichung,

$state_1$ mit Diskretisierungsvariante (b) berechnete Zustandsgröße,

$state_2$ mit Diskretisierungsvariante (a) berechnete Zustandsgröße.

Die der Darstellung in Bild 6.86 zu entnehmenden Minimal- und Maximalwerte der relativen Ergebnisabweichungen für die vier betrachteten Zustandsgrößen werden in Tabelle 6.8 zusammengefasst.

	ΔPW_{rel}	$\Delta\sigma_{min_rel}$	$\Delta\sigma_{max_rel}$	$\Delta\eta_{m_rel}$
$ \Delta_{min} $	-10×10^{-2}	-24×10^{-2}	2×10^{-2}	10×10^{-2}
$ \Delta_{max} $	-12×10^{-2}	-43×10^{-2}	6×10^{-2}	16×10^{-2}

Tabelle 6.8: Betragsmäßig minimale und maximale relative Ergebnisabweichungen entlang der Bohrlochkontur aufgrund von Variationen der Modelldiskretisierung für Berechnungen mit dem FTK-Simulator für die vier Zustandsgrößen Porenwasserdruck, kleinste Hauptspannung, größte Hauptspannung und Matrixausnutzungsgrad

Tabelle 6.8 kann entnommen werden, dass sich durch die Modifikation der Diskretisierung für alle vier betrachteten Zustandsgrößen signifikante Veränderungen ergeben haben. Am geringsten sind die entlang der Kontur des Bohrlochs mit den beiden unterschiedlichen Modellvarianten berechneten relativen Abweichungen mit Zahlenwerten von $2\% \leq \Delta\sigma_{max_rel} \leq 6\%$ noch in Bezug auf die maximalen Hauptspannungen. Am größten sind die durch die Modifikation der Diskretisierung entlang der Kontur eintretenden Zustandsgrößenänderungen mit Zahlenwerten von $24\% \leq \Delta\sigma_{min_rel} \leq 43\%$ für die minimalen Hauptspannungen.

An den Vorzeichen der in Tabelle 6.8 aufgeführten Zahlenwerte ist zu erkennen, dass die entlang der Bohrlochkontur ermittelten minimalen Hauptspannungen bedingt durch die feinere Diskretisierung entlang der Bohrlochkontur stark abgenommen haben, während die ermittelten maximalen Spannungen im Gegensatz dazu etwas zugenommen haben. Der berechnete Porenwasserdruck wiederum hat durch die Verfeinerung der Diskretisierung entlang der Bohrlochkontur für die numerische Simulation unter Anwendung der Modellierungsvariante



(b) gegenüber der numerischen Simulation unter Anwendung der Modellierungsvariante (a) um Zahlenwerte von $10\% \leq \Delta\sigma_{\min_rel} \leq 12\%$ abgenommen.

Die größte und die kleinste Hauptspannung stellen gemeinsam mit dem vorherrschenden Porenwasserdruck die Eingangsparameter für die Berechnung der Ausnutzungsgrade der Gebirgsmatrix unter Bezugnahme auf das Mohr-Coulomb'sche Bruchkriterium dar. Da für den Fall einer feineren Modelldiskretisierung entlang der Bohrlochkontur, wie vorangehend schon beschrieben worden ist, die ermittelten an der Bohrlochkontur vorherrschenden kleinsten Hauptspannungen geringer ausfallen als für den Fall einer gröberen Diskretisierung und da weiterhin für die größten Hauptspannungen bei einer feineren Diskretisierung des Gebirges unmittelbar an der Bohrlochkontur größere Zahlenwerte berechnet werden, sind in Bezug auf die Ausnutzungsgrade der Gebirgsmatrix bei Anwendung der Modellvariation (b) ebenfalls größere Zahlenwerte ermittelt worden als bei der Anwendung der Modellvariation (a). Die relativen Abweichungen haben entlang der Bohrlochkontur Zahlenwerte von $10\% \leq \Delta\epsilon_{m_rel} \leq 16\%$ betragen. Zwar wirkt sich der ebenfalls für den Fall der Modellvariation (b) ermittelte abgesenkte Porenwasserdruck positiv auf die entlang der Kontur ermittelten Ausnutzungsgrade der Gebirgsmatrix aus, jedoch bewirken die Veränderungen der größten und der kleinsten vorherrschenden Hauptspannungen dennoch den Tabelle 6.8 und Bild 6.86 zu entnehmenden deutlichen Anstieg der Matrixausnutzungsgrade.

Ein Vergleich von Tabelle 6.8 mit der Tabelle 6.7 aus Abschnitt 6.4.3.5(b) verdeutlicht, dass zumindest für den Bohrlochkonturbereich die in Abschnitt 6.4.3.5(c) analysierte Modifikation der Diskretisierung des Bohrlochscheibenmodells einen erheblich größeren Einfluss auf die Berechnungsergebnisse hat als die in Abschnitt 6.4.3.5(b) diskutierten Variationen bezüglich der Zeitschrittsteuerung bei der Durchführung von numerischen Simulationen mittels des FTK-Simulators.

Der Vergleich der durch die Zeitschrittvariationen hervorgerufenen Ergebnisdifferenzen mit den durch die Diskretisierungsvariationen bedingten Ergebnisdifferenzen im Kontext dieses Vorhabens ist nicht als Legitimation für die ermittelten zeitschrittsteuerungsbedingten relativen Ergebnisabweichungen zu verstehen. Die Gegenüberstellung der auf die beiden vorangehend untersuchten unterschiedlichen Ursachen zurückzuführenden relativen Ergebnisabweichungen dient dazu aufzuzeigen, dass das Streubreitenband der sich bedingt durch die Zeitschrittsteuerungsvariationen bei der Anwendung des FTK-Simulators für die betrachteten Zustandsgrößen ergebenden unterschiedlichen Simulationsergebnisse im Vergleich zum

durch die Diskretisierungsvariationen hervorgerufenen Streubreitenband sehr schmal ausfällt. Somit dient der Vergleich der in Abschnitt 6.4.3.5(b) und Abschnitt 6.4.3.5(c) beschriebenen relativen Ergebnisabweichungen lediglich zur Bestätigung des bereits bei der isolierten Betrachtung der Berechnungsergebnisse in Abschnitt 6.4.3.5(b) zu gewinnenden Eindrucks einer relativ großen Robustheit der mit dem FTK-Simulator mittels des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs durchgeführten numerischen Berechnungen in Bezug auf die Zeitschrittsteuerung.

Nachdem in Abschnitt 6.4.3.5(b) und Abschnitt 6.4.3.5(c) zunächst zwei zentrale Einflüsse auf die mittels des FTK-Simulators generierten Berechnungsergebnisse untersucht worden sind, werden nachfolgend in Abschnitt 6.4.3.5 keine weiteren Berechnungsvariationen für die mit dem FTK-Simulator durchgeführten Berechnungen mehr miteinander verglichen, sondern es erfolgt in Abschnitt 6.4.3.5(d) die Gegenüberstellung der Berechnungsergebnisse für die am quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs mittels des FTK-Simulators und mit dem Simulator FLAC^{3D} durchgeführten numerischen Simulationen. Für den Vergleich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Zustandsgrößen ist die Modellierungsvariante (a) aus Bild 6.85 mit dem Unterteilungsratio von $r_r = 1,25$ in radialer Richtung verwendet worden. Die mittels des FTK-Simulators generierten Zustandsgrößen sind unter Anwendung eines Zeitschrittsteigerungsfaktors von $F_{St} = 1,005$ berechnet worden.

(d) Vergleich der unter Anwendung des FTK-Simulators generierten Berechnungsergebnisse mit den unter Anwendung des Simulators FLAC^{3D} generierten Berechnungsergebnissen

(d 1) Gegenüberstellung der ermittelten Porenwasserdrücke

In Bild 6.87 kann zunächst die Porenwasserdruckverteilung entlang der Kontur des Bohrlochs im stationären Zustand betrachtet werden. Bild 6.87 ist zu entnehmen, dass sowohl die mittels des FTK-Simulators wie auch die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdrücke entlang der Kontur des Bohrlochs einen sehr konstanten Verlauf aufweisen.

Anmerkung: Bei den im vorliegenden Abschnitt und auch bei den in den nachfolgenden Abschnitten im Rahmen des Ergebnisvergleichs vorgestellten Porenwasserdrücken handelt es

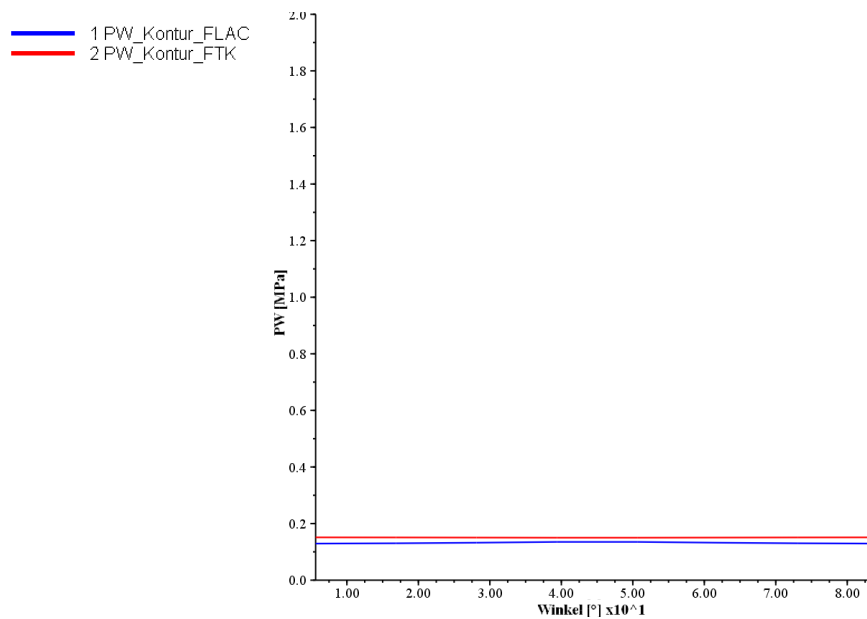


Bild 6.87: Gegenüberstellung der Porenwasserdruckverteilungen im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs im Konturschnitt (First bei $\varphi = 0^\circ$, Stoß bei $\varphi = 90^\circ$) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blauer Graph) und dem FTK-Simulator (roter Graph)

sich grundsätzlich um in den Schwerpunkten der zur Ergebnisanalyse betrachteten Gebirgszonen berechnete Porenwasserdrücke. Während bei der Verwendung des Simulators $FLAC^{3D}$ die Möglichkeit besteht, zwischen den Optionen zu wählen, die in den Knotenpunkten eines Modells vorherrschenden Porenwasserdrücke oder die in den Zonenschwerpunkten vorherrschenden Porenwasserdrücke zu berechnen, berechnet der FTK-Simulator grundsätzlich die Porenwasserdrücke in den Zonenschwerpunkten. Daher werden für den im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten Ergebnisvergleich stets die mittels der beiden unterschiedlichen zum Einsatz gekommenen Simulatoren in den Zonenschwerpunkten berechneten Porenwasserdrücke herangezogen.

Alle für die Schwerpunkte der entlang der Bohrlochkontur gelegenen Zonen berechneten Porenwasserdrücke liegen in einem Zahlenwertebereich zwischen $0,17 \text{ MPa} < P_w < 0,18 \text{ MPa}$. Die in rot dargestellten, mittels des FTK-Simulators berechneten Porenwasserdrücke liegen dabei durchgängig geringfügig oberhalb der in blau dargestellten, vom Simulator $FLAC^{3D}$ generierten Porenwasserdrücke. Die Skalierung der y-Achse mit einem maximal darstellbaren Porenwasserdruck von $P_w = 2,0 \text{ MPa}$ orientiert sich an dem für das Gebirge im Rahmen der durchgeführten Simulationsarbeiten angenommenen primären Porenwasserdruck von $P_i = 2,0 \text{ MPa}$. Bezogen auf den primär im Gebirge angenommenen Porenwasserdruck liegt die relative

Abweichung zwischen den von den beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Porenwasserdrücken entlang der Bohrlochkontur in einem Zahlenwertebereich von $\Delta_{rel} < 1\%$. Für die Porenwasserdruckverteilung entlang der Bohrlochkontur im stationären Zustand konnte für die numerischen Simulationen mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs somit eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Berechnungsergebnissen festgestellt werden.

Nachfolgend sind die Porenwasserdruckverteilungen, die für den stationären Zustand mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechnet worden sind, zunächst in Bild 6.88 im Horizontalschnitt und anschließend in Bild 6.89 im Diagonalschnitt zu betrachten.

Aus dem nahezu identischen Verlauf der beiden in Bild 6.88 dargestellten Zahlenwertegraphen kann geschlussfolgert werden, dass im horizontal von der Bohrlochkontur zum Modellrand verlaufenden Schnitt durch das modellierte Gebirge eine präzise Übereinstimmung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und den mittels des FTK-Simulators generierten Simulationsergebnissen vorliegt. Der Betrachtung des Diagramms in Bild 6.89 ist zu entnehmen, dass eine derart präzise Ergebnisübereinstimmung, wie sie für die im Horizontalschnitt dargestellten Porenwasserdrücke erzielt werden konnte, für die im unter $\alpha = 45^\circ$ von der Bohrlochkontur zum Modellrand verlaufenden Diagonalschnitt berechneten Porenwasserdrücke nicht vorliegt. Während die mittels des FTK-Simulators und mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ generierten Porenwasserdrücke im unmittelbar an der Bohrlochkontur gelegenen Gebirgsbereich sowie im unmittelbar am äußeren Modellrand gelegenen Gebirgsbereich augenscheinlich sehr gute Übereinstimmungen aufweisen, sind die Verläufe der beiden in Bild 6.89 zu betrachtenden Graphen im zentral zwischen Bohrlochkontur und Modellrand gelegenen Gebirgsbereich optisch deutlich voneinander zu unterscheiden.

Zur vertiefenden Analyse der Ergebnisdifferenzen zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Porenwasserdruckverteilungen werden nachfolgend zunächst die Plotdarstellungen der berechneten Porenwasserdrücke miteinander verglichen. Zusätzlich werden mit dem Zweck einer Quantifizierung sowie mit dem Zweck einer räumlichen Lokalisierung der aus der Verwendung der beiden unterschiedlichen Simulatoren resultierenden Ergebnisdifferenzen die im Nachlauf berechneten relativen Porenwasserdruckabweichungen ebenfalls in Form eines Flächenplots dargestellt. Zur Berechnung der relativen

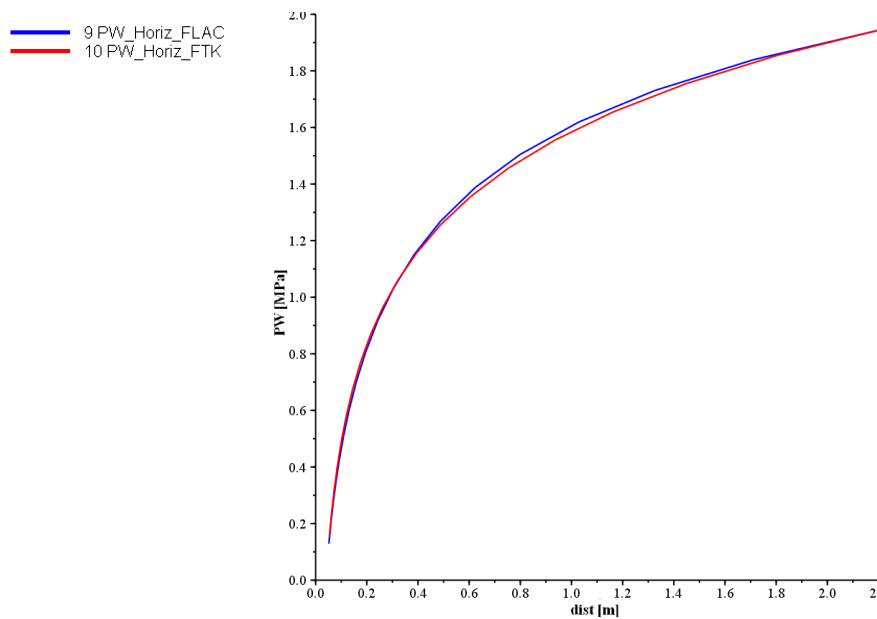


Bild 6.88: Gegenüberstellung der Porenwasserdruckverteilungen im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs im Horizontalschnitt für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blauer Graph) und dem FTK-Simulator (roter Graph)

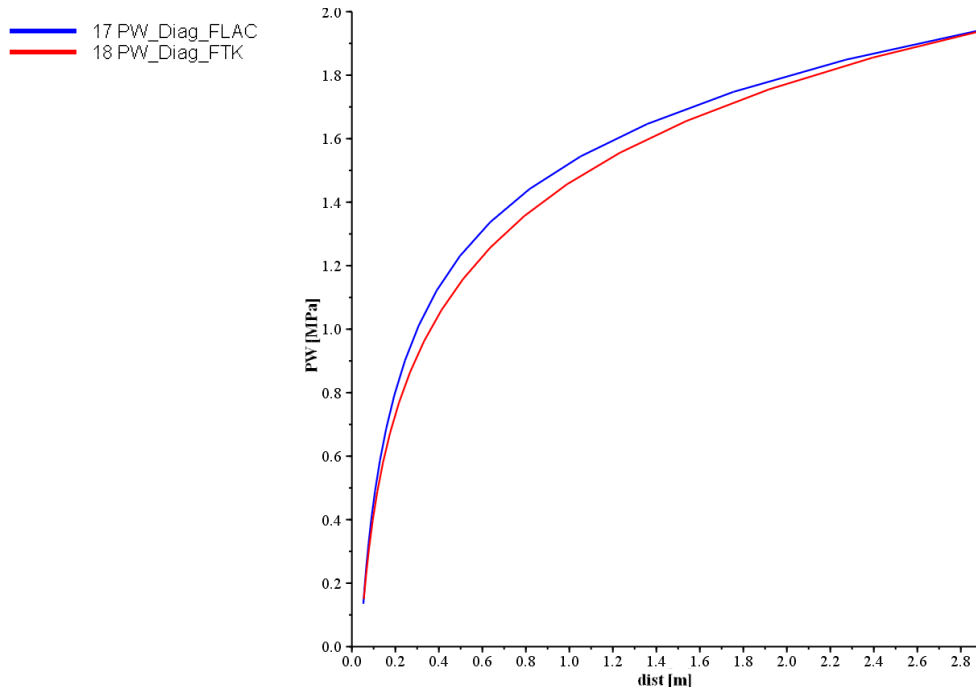


Bild 6.89: Gegenüberstellung der Porenwasserdruckverteilungen im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs im Diagonalschnitt für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blauer Graph) und dem FTK-Simulator (roter Graph)

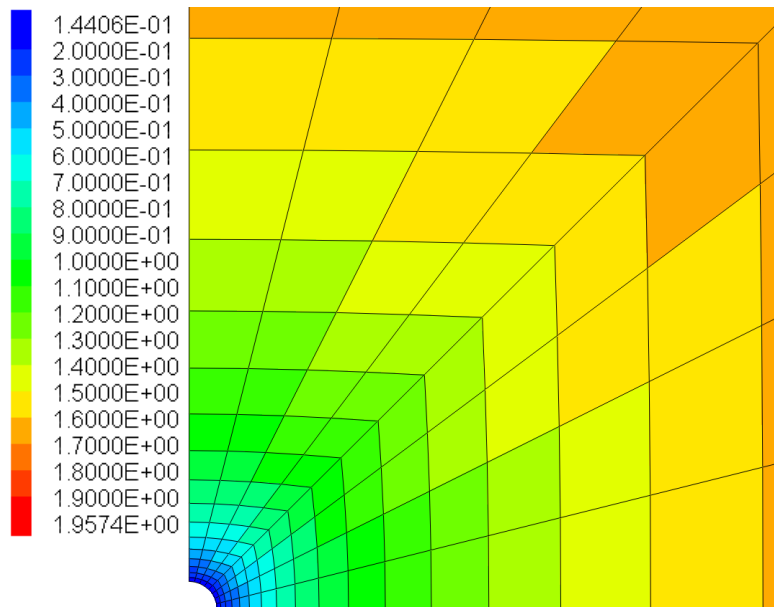


Bild 6.90: Porenwasserdruckverteilung im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

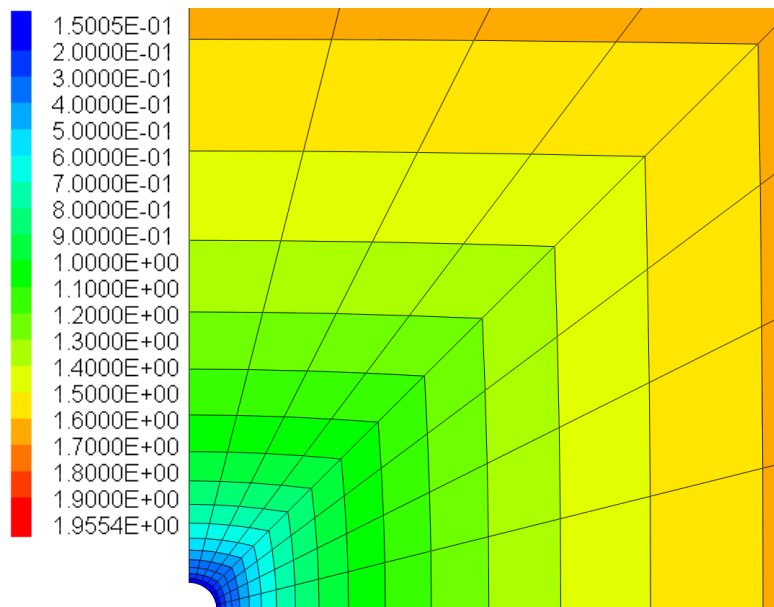


Bild 6.91: Porenwasserdruckverteilung im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

Abweichungen der Zustandsgrößen ist Gleichung (6.21) verwendet worden. Gleichung (6.21) entspricht Gleichung (6.19) aus Abschnitt 6.4.3.5(b) mit nachfolgend aufgeführter abgewandelter Bedeutung der Variablen $state_1$ und $state_2$:

$$\Delta_{state} = \frac{state_1 - state_2}{state_2} \quad (6.21)$$

mit

Δ_{state} im Flächenplot dargestellte relative Zustandsgrößenabweichung,

$state_1$ mit dem FTK-Simulator berechnete Zustandsgröße,

$state_2$ mit dem Simulator FLAC^{3D} berechnete Zustandsgröße.

Der vergleichenden Betrachtung der Darstellungen der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren unter Verwendung des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs berechneten Porenwasserdruckverteilungen in Bild 6.90 und Bild 6.91 kann entnommen werden, dass sich die mit dem Simulator FLAC^{3D} und mittels des FTK-Simulators generierten Porenwasserdruckverteilungen qualitativ grundlegend voneinander unterscheiden.

Während die unter Verwendung des Simulators FLAC^{3D} berechnete Porenwasserdruckverteilung einen radialsymmetrisch in Richtung der Bohrlochkontur abnehmenden Porenwasserdruck im Gebirge abbildet, ist eine derartige radialsymmetrische Porenwasserdruckverteilung für die mittels des FTK-Simulators erhaltenen Simulationsergebnisse nicht zu erkennen.

Um die Differenzen zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Porenwasserdruckverläufe präziser analysieren zu können, sind in Bild 6.92 die relativen Abweichungen zwischen den generierten Porenwasserdrücken im Flächenplot dargestellt.

Die bereits bei der vergleichenden Betrachtung von Bild 6.90 und Bild 6.91 wahrnehmbare Differenz zwischen den vom Simulator FLAC^{3D} und mittels des FTK-Simulators berechneten Porenwasserdruckverteilungen wird durch die Bild 6.92 zu entnehmende Visualisierung der relativen Porenwasserdruckabweichungen verdeutlicht. Die in Bild 6.92 dargestellten relativen Abweichungen bezüglich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs berechneten Porenwasserdrücke sind entsprechend der Gleichung (6.21) in Abschnitt 6.4.3.5(d1) ermittelt worden.

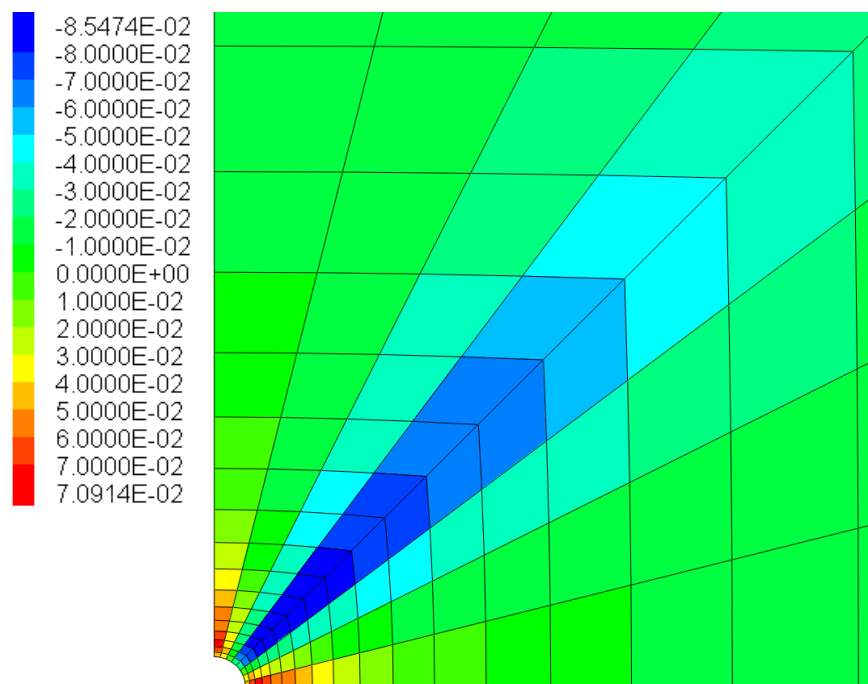


Bild 6.92: Relative Abweichungen zwischen den in Bild 6.90 und Bild 6.91 dargestellten, mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und dem FTK-Simulator für den stationären Zustand berechneten Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Porenwasserdruckabweichung bezogen auf den von $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

Der in Bild 6.92 zu betrachtenden Farbskala kann entnommen werden, dass die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Porenwasserdrücke sich über einen Zahlenwertebereich von $-8,5\% \leq \Delta_{rel} \leq +7\%$ erstrecken. Auffällig bei der Betrachtung von Bild 6.92 ist die systematische Struktur der Verteilung der relativen Porenwasserdruckabweichungen. Modellbereiche mit eher nur geringen relativen Porenwasserdruckabweichungen sind in Bild 6.92 in Grüntönen dargestellt, während die Bereiche mit großen Porenwasserdruckabweichungen entweder in Rot- oder Orangetönen oder in unterschiedlich abgestuften Blautönen dargestellt sind. In Übereinstimmung mit den Verläufen der Zahlenwertegraphen in Bild 6.89 sind bei der Betrachtung von Bild 6.92 große relative Porenwasserdruckabweichungen im Bereich des Diagonalschnitts durch das Gebirge identifizierbar. Der Betrachtung von Bild 6.92 ist zu entnehmen, dass in den im Bereich des Diagonalschnitts gelegenen Zonen des Modells die mittels des FTK-Simulators generierten Porenwasserdrücke um bis zu $\Delta_{rel} \approx -8,5\%$ unterhalb der mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Porenwasserdrücke liegen. Auf Basis der Darstellung der Zahlenwertegraphen in Bild 6.89 nicht zu erwarten gewesen ist allerdings die Tatsache, dass sich auch für den sehr nah an

der Bohrlochkontur gelegenen Gebirgsbereich bereits signifikante Ergebnisunterschiede ergeben.

Die kombinierte Betrachtung von Bild 6.89 und Bild 6.92 legt somit die Schlussfolgerung nahe, dass für den im Rahmen dieses Vorhabens durchzuführenden Vergleich der mit den zwei unterschiedlichen Simulatoren generierten Simulationsergebnisse die Betrachtung von Zustandsgrößen lediglich in einer Schnittdarstellung nicht hinreichend ist, da insbesondere für Gebirgsbereiche mit auf kleinem Raum auftretenden großen Zustandsgrößenänderungen und den daraus resultierenden steil ansteigenden Verläufen der Zahlenwertegraphen die alleinige Betrachtung von Zahlenwertegraphen im Rahmen der Ergebnisanalyse irreführend bezüglich der Ergebnisübereinstimmung sein kann. Die der dunkelblauen Färbung der konturnahen Gebirgselemente in Bild 6.92 zu entnehmenden relativen Porenwasserdruckabweichungen von $\Delta_{\text{rel}} \approx 8\%$ sind aus der Betrachtung der beiden Zahlenwertegraphen in Bild 6.89 nicht zu schlussfolgern gewesen. Weitere große relative Abweichungen in Bezug auf die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Porenwasserdrücke lassen sich aus der Betrachtung von Bild 6.92 für die horizontal und vertikal ins Gebirge hinein verlaufenden konturnahen Gebirgsbereiche identifizieren. In den beiden in Bild 6.92 in rot, orange oder gelb dargestellten Gebirgsbereichen übertreffen die mittels des FTK-Simulators berechneten Porenwasserdrücke die unter Verwendung des Simulators FLAC^{3D} generierten Porenwasserdrücke um $\Delta_{\text{rel}} \approx 7\%$. Wie vorangehend beschrieben, entsteht bei der Betrachtung von Bild 6.89 der Eindruck einer nahezu vollständigen Übereinstimmung der mittels FTK-Simulator und mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdrücke.

Zwar stellen sowohl der Vergleich von Berechnungsergebnissen anhand der Gegenüberstellung von Zahlenwertegraphen in Schnittdarstellungen wie auch die Darstellung von relativen Ergebnisabweichungen in Flächenplots sinnvolle und notwendige Maßnahmen zur vergleichenden Gegenüberstellung von Simulationsergebnissen dar, allerdings hat sich im Rahmen des Ergebnisvergleiches für das zweidimensionale Bohrlochscheibenmodell, wie den vorangehenden Ausführungen zu entnehmen ist, gezeigt, dass die Darstellung der relativen Zustandsgrößenabweichung im Flächenplot qualitativ aussagekräftiger und quantitativ präziser ist, weshalb die in den nachfolgenden Abschnitten beschriebenen Ergebnisvergleiche für die mittels des FTK-Simulators und mit dem Simulator FLAC^{3D} durchgeführten Berechnungen überwiegend anhand der Betrachtung von Flächenplotdarstellungen der relativen Zustandsgrößenabweichungen vorgenommen werden.



Die Betrachtung von Bild 6.90 und Bild 6.91 führt unter Einbeziehung der im Bereich der Geohydraulik gemeinhin vorliegenden Erfahrungen sowie unter Bezugnahme auf der Literatur zu entnehmende analytische Lösungen zu dem Schluss, dass die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechnete, radialsymmetrisch um das simulierte Bohrloch herum ausgebildete Porenwasserdruckverteilung realitätsnäher ist als die mittels des FTK-Simulators berechnete, nicht radialsymmetrisch ausgebildete Porenwasserdruckverteilung. Im Rahmen der Anfertigung des vorliegenden Berichts ist daher der Frage nachzugehen gewesen, weshalb bei der Berechnung mittels des FTK-Simulators eine nicht radialsymmetrische und somit im Vergleich zu der mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdruckverteilung weniger realitätsnahe Porenwasserdruckverteilung für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs generiert worden ist.

Zur Beantwortung der Frage nach der Ursache für die bei der Berechnung mittels des FTK-Simulators erhaltene, nicht radialsymmetrische Porenwasserdruckverteilung ist es zunächst erforderlich zu erläutern, dass bei der Verwendung der Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2 grundsätzlich unterschiedliche Anforderungen bezüglich der verwendeten Diskretisierung bestehen. Während es bei der Verwendung des mechanisch orientierten Simulators FLAC^{3D} primär entscheidend ist, die Diskretisierung eines Modells dahingehend auszurichten, dass konturnahe Gebirgsbereiche hinreichend fein diskretisiert werden, um die dort nach Ausbruch des Hohlraumes stattfindenden Spannungsumlagerungen und hydraulischen Strömungsprozesse möglichst genau abbilden zu können, ist es zur Gewährleistung von möglichst genauen numerischen Simulationen mit dem hydraulisch orientierten Simulator TOUGH2 erforderlich, davon abweichende programmspezifische Anforderungen an die Struktur der Diskretisierung zu erfüllen.

Die programmspezifischen Anforderungen, die bei der Diskretisierung eines Modells zur Durchführung von hydraulischen Berechnungen mit dem Simulator TOUGH2 zu erfüllen sind, sind dahingehend ausgerichtet, dass zur Gewährleistung der numerischen Korrektheit der simulierten hydraulischen Prozesse eine so genannte *Voronoi*-Struktur in der geometrischen Ausbildung der verwendeten Diskretisierung erforderlich ist. Bild 6.93 zeigt ein Beispiel für eine *Voronoi*-Struktur.

Per Definition ist ein *Voronoi*-Diagramm zu einer vorgegebenen diskreten Stützpunktemenge die Gesamtheit der Punkte im Raum, die jeweils zu mindestens zweien der vorgegebenen Stützpunkte denselben Abstand haben. Anschaulich bildet das *Voronoi*-Diagramm damit also

ein Grenzflächennetz zwischen um die Stützpunkte herum liegende Zonen. Als Folge enthält jede solche Zone genau einen der vorgegebenen Stützpunkte, und jede Grenze zwischen zwei Zonen verläuft mittig und senkrecht zu der Verbindungslinie der beiden Zonenstützpunkte.

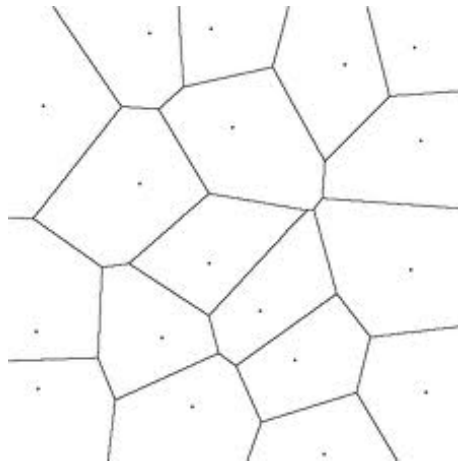


Bild 6.93: Beispielhafte Darstellung einer Voronoi-Struktur

Die Modelldiskretisierung für eine FTK-Simulation wird mithilfe des Präprozessors des Simulators $FLAC^{3D}$ erstellt und besitzt für gewöhnlich keine *Voronoi*-Struktur. Auch der Versuch, neben die Zonenschwerpunkte einen separaten Stützpunktesatz in die $FLAC^{3D}$ -Modellzonen auf eine Weise zu legen, dass das bestehende Zonengrenzflächennetz ein *Voronoi*-Diagramm zu dem Stützpunktesatz bildet, schlägt in der Regel fehl. Unter der Annahme aber, dass eher geringfügige Abweichungen von einer *Voronoi*-Struktur auch nur geringfügige Abweichungen in den Berechnungsergebnissen mit TOUGH2 nach sich ziehen, stellt sich nun die Frage, inwieweit es möglich ist, mit dem $FLAC^{3D}$ -Präprozessor eine einer *Voronoi*-Diskretisierung ähnlichen Modelldiskretisierung zu generieren.

Eine *Voronoi*-Diskretisierung ist genau dann im Rahmen der Modellierung besonders schwer zu erreichen, wenn die Zonen eines Modells nicht alle in etwa die gleichen Abmessungen besitzen, sondern die Volumina von benachbarten Zonen im Modell sich signifikant voneinander unterscheiden. Signifikante Differenzen zwischen den Volumina benachbarter Zonen liegen dann vor, wenn, wie es beispielsweise für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs der Fall ist, die Breite der einzelnen Zonen in radialer Richtung mit zunehmendem Abstand von der Hohlraumkontur – gesteuert durch einen Vergrößerungsfaktor – exponentiell anwächst.

Neben dem Größenverhältnis von benachbarten Zonen innerhalb eines numerischen Modells kann auch die Form der einzelnen Zonen für den nicht *Voronoi*-artigen Charakter einer Dis-

kretisierung verantwortlich sein. Für das Beispiel des zweidimensionalen Bohrlochscheibenmodells führt der Übergang von einer ringartigen Anordnung der Zonen im konturnahen Gebirgsbereich zu einer linearen Anordnung der Zonen im Bereich der Modellränder ebenfalls dazu, dass sich signifikante Unterschiede der für die Berechnungen verwendeten Diskretisierung gegenüber einer *Voronoi*-Struktur ergeben.

Im Rahmen der Anfertigung des vorliegenden Berichts hat eine erste grundlegende Befassung mit den Diskretisierungsstruktureinflüssen bei der Durchführung von hydraulischen Berechnungen mit dem Simulator TOUGH2 sowie bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen mittels des FTK-Simulators stattgefunden. Zur Analyse der Struktureinflüsse sind nach den Diskretisierungsvariationen in Abschnitt 6.4.3.5(b) erneut Variationen der Diskretisierung des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs vorgenommen worden. Die Auswirkungen der Diskretisierungsvariationen auf die berechneten sekundären hydraulischen Potenzialfelder werden im nachfolgenden Abschnitt vorgestellt und diskutiert.

(d 2) Zum Einfluss von nicht Voronoi-artigen Diskretisierungsstrukturen

Im vorangehenden Abschnitt sind im Rahmen der vergleichenden Betrachtung der vom Simulator FLAC^{3D} und der vom FTK-Simulator generierten Porenwasserdruckverteilungen systematische Unterschiede bezüglich der flächenhaften Ausbreitung des sich um das modellierte Bohrloch herum ausbildenden Porenwasserdruckabsenktrichters identifiziert worden. Während im Verlauf der Berechnungen mit dem Simulator FLAC^{3D} die Ausbildung eines in lateraler Orientierung zur Bohrlochlängsachse radialsymmetrischen Porenwasserdruckabsenktrichters beobachtet werden konnte, hat sich, wie Bild 6.91 zu entnehmen ist, im Verlauf der Berechnungen mit dem FTK-Simulator ein lateral zur Bohrlochlängsachse nicht radialsymmetrischer, sondern tendenziell in seiner flächenhaften Ausbildung eher quadratisch anmutender Porenwasserdruckabsenktrichter ausgebildet. Die Berechnungen, die zur Generierung der im vorliegenden Abschnitt vorgestellten Simulationsergebnisse geführt haben, sind mit den Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2 durchgeführt worden. Bei den durchgeführten Berechnungen hat es sich im Gegensatz zu den im vorherigen Abschnitt vorgestellten Berechnungen um rein hydraulische Berechnungen ohne die Berücksichtigung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Wechselwirkungen im Gebirge gehandelt. Der Zweck der Durchführung von rein hydraulischen numerischen Simulationen ist es gewesen, zu untersuchen, ob die

vorangehend identifizierten strukturellen Unterschiede bezüglich der sich ausbildenden sekundären hydraulischen Potenzialfelder auf grundlegende Differenzen bei der Durchführung rein hydraulischer numerischer Analysen zwischen den Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2 zurückzuführen sind oder ob der Ursprung der Ergebnisabweichungen auf Faktoren, die im Bereich der Kopplung der Programmcodes FLAC^{3D} und TOUGH2 und im Bereich der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen mit dem FTK-Simulator zu suchen sind, zurückzuführen ist.

Um darüber hinaus auch eine mangelnde Feinheit der Diskretisierung als möglichen negativen Einflussfaktor auf die Berechnungsergebnisse ausschließen zu können und um systematische Unterschiede zwischen den mittels der Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2 generierten Porenwasserdruckverteilungen besser visualisieren zu können, ist das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs für die Untersuchungen zum Einfluss von nicht *Voronoi*-artigen Diskretisierungsstrukturen zunächst deutlich feiner diskretisiert worden als es für die in den vorangehenden Abschnitten vorgestellten Berechnungen der Fall gewesen ist. Um die strukturellen Differenzen in Bezug auf die von den mittels der beiden Simulatoren generierten Porenwasserdruckverteilungen besser identifizieren zu können, ist die Zonenanzahl des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs von einer Anzahl von ursprünglich $n_E = 176$ Zonen auf eine Anzahl von $n_E \approx 5000$ Zonen erhöht worden. Darüber hinaus ist zur durchgeführten Untersuchung des Einflusses nicht *Voronoi*-artiger Diskretisierungsstrukturen anstelle des zuvor zum Einsatz gekommenen Viertelscheibenmodells ein vollständiges scheibenartiges Bohrlochmodell verwendet worden. Die Porenwasserdruckverteilung im stationären Strömungszustand, die mittels der rein hydraulischen Berechnung mit dem Simulator FLAC^{3D} für das scheibenartige Bohrlochmodell mit einer Anzahl von $n_E \approx 5000$ Elementen ermittelt worden ist, ist in Bild 6.94 zu betrachten.

Deutlicher noch als für das weit weniger fein diskretisierte Modell in Bild 6.90 zeigt sich in Bild 6.94 die in der Ebene lateral zur Bohrlochlängsachse radialsymmetrische Form des Porenwasserdruckabsenktrichters um das modellierte Bohrloch herum. Ebenfalls weit deutlicher als für das in Bild 6.91 zu betrachtende, sehr viel gröber diskretisierte Modell zeigt sich bei der Betrachtung von Bild 6.95 die nicht radialsymmetrische, sondern in ihrer flächenhaften Ausdehnung eher quadratisch anmutende Form des Porenwasserdruckabsenktrichters, die im Rahmen der mit dem Simulator TOUGH2 durchgeführten rein hydraulischen numerischen Simulation erhalten worden ist.

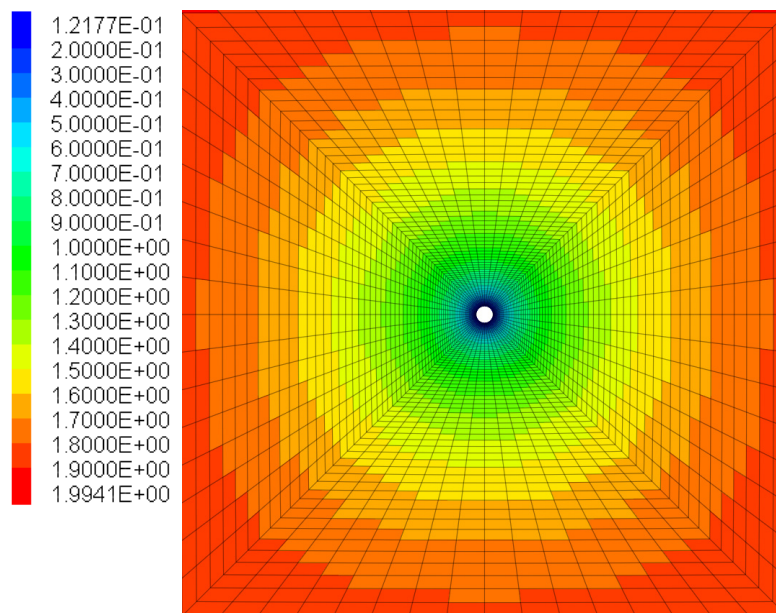


Bild 6.94: Radialsymmetrische Porenwasserdruckverteilung im stationären Zustand für ein quasi-zweidimensionales scheibenartiges Berechnungsmodell eines Bohrlochs mit einer nicht Voronoi-artigen Diskretisierungsstruktur im Flächenplot für eine rein hydraulische Simulation, berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

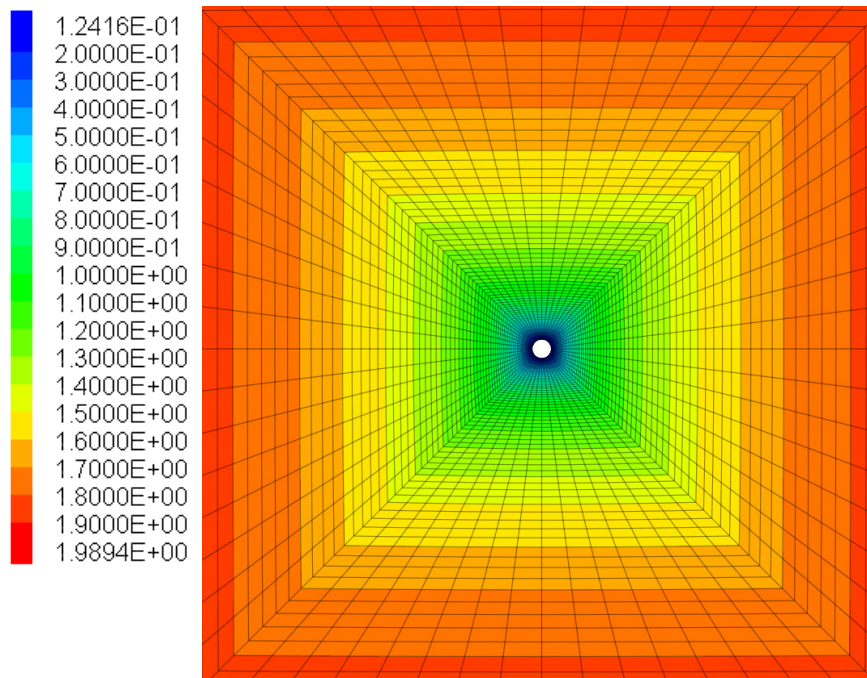


Bild 6.95: Nicht radialsymmetrische Porenwasserdruckverteilung im stationären Zustand für ein quasi-zweidimensionales scheibenartiges Berechnungsmodell eines Bohrlochs mit einer nicht Voronoi-artigen Diskretisierungsstruktur im Flächenplot für eine rein hydraulische Simulation, berechnet mit TOUGH2 – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

Die vergleichende Betrachtung von Bild 6.94 und Bild 6.95 verdeutlicht auf eindrucksvolle Weise, dass die im Rahmen der mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs durchgeführten numerischen Simulationsarbeiten identifizierten systematischen Unterschiede bezüglich der generierten Porenwasserdrücke nicht etwa dem bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulationen zu berücksichtigenden Einfluss der Mechanik auf die Hydraulik geschuldet sind und dass darüber hinaus die identifizierten systematischen Porenwasserdruckunterschiede nicht auf Effekte zurückzuführen sind, die bei der Anwendung des FTK-Simulators durch das Zusammenspiel der Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2 entstehen. Vielmehr bestätigt der Vergleich der in Bild 6.94 und Bild 6.95 dargestellten, mittels der beiden Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2 im Rahmen von rein hydraulischen numerischen Analysen generierten Porenwasserdruckverteilungen den Verdacht bezüglich der grundsätzlichen Anforderungsunterschiede an die Diskretisierungsstruktur bei der Anwendung der Simulatoren FLAC^{3D} und TOUGH2.

Um überprüfen zu können, ob für den Fall der nur hydraulischen numerischen Simulation mit dem Simulator TOUGH2 unter Anwendung eines Modells mit *Voronoi*-Diskretisierung eine radialsymmetrische und somit realitätsnähere Porenwasserdruckverteilung für den stationären Strömungszustand generiert werden kann, ist die Diskretisierung des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs ein weiteres Mal verändert worden. Da eine nur hydraulische Berechnung mit dem Simulator TOUGH2 auch bei der Verwendung von Modellen mit großen Zonenanzahlen keine signifikante Problematik im Hinblick auf die zu erwartenden Berechnungszeiten mit sich bringt und da bei einer nur hydraulischen numerischen Simulation keine geomechanischen Qualitätskriterien in Bezug auf die Modelldiskretisierung berücksichtigt werden müssen, konnte für die hier durchgeführten grundlegenden Untersuchungen zum Diskretisierungseinfluss ein auf sehr einfache Weise *Voronoi*-artig diskretisiertes Modell verwendet werden.

Zur Generierung einer einfachen *Voronoi*-Struktur ist das Bohrlochscheibenmodell in in der Ebene lateral zur Bohrlochlängsachse quadratisch geformte gleich große Zonen unterteilt worden. Die Bohrlochkontur ist extrem stark vereinfachend ebenfalls quadratisch modelliert worden und dabei in gerade einmal acht Zonen unterteilt worden. Die vorangehend beschriebene einfache *Voronoi*-Struktur des modifizierten Bohrlochscheibenmodells sowie die mit diesem *Voronoi*-artig diskretisierten Modell für die Berechnung mit dem Simulator TOUGH2

im stationären Strömungszustand ermittelte Porenwasserdruckverteilung kann Bild 6.96 entnommen werden.

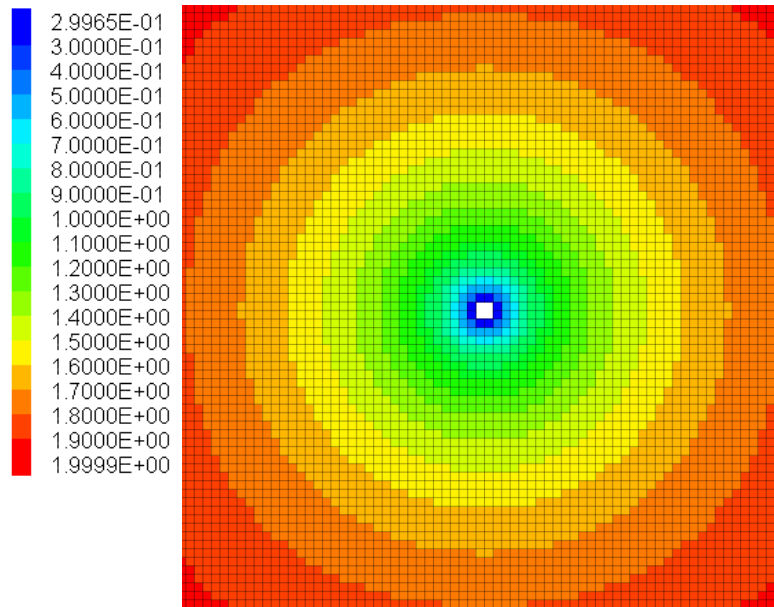


Bild 6.96: Radialsymmetrische Porenwasserdruckverteilung im stationären Zustand für ein quasi-zweidimensionales scheibenartiges Berechnungsmodell eines Bohrlochs mit einer Voronoi-Diskretisierung und vereinfachend quadratisch diskretisierter Bohrlochkontur im Flächenplot für eine nur hydraulische Simulation, berechnet mit TOUGH2 – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

Sehr deutlich ist in Bild 6.96 die radialsymmetrische Ausbildung des Porenwasserdruckabsenktrichters um das modellierte Bohrloch herum zu erkennen. Aus der vergleichenden Betrachtung von Bild 6.95 und Bild 6.96 lässt sich schlussfolgern, dass die Diskretisierungsstruktur des Gebirgsmodells bei der Durchführung von Berechnungen mit dem Simulator TOUGH2 und somit insbesondere auch bei der Durchführung von numerischen Simulationen mit dem FTK-Simulator einen signifikanten Einfluss auf die berechneten Porenwasserdrücke hat. Zur Erlangung von realitätsnahen Simulationsergebnissen ist es daher grundsätzlich erforderlich, bei der Durchführung von hydraulischen Berechnungen mit dem Simulator TOUGH2 sowie bei der Durchführung von hydraulischen und hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen mit dem FTK-Simulator Modelle mit einer *Voronoi*-Diskretisierung zu verwenden.

Aufgrund der Anforderungen, die aus der geomechanischen Betrachtungsweise heraus an die Diskretisierungsstruktur der verwendeten Modelle zu formulieren sind, ist es im Rahmen der zur Anfertigung des vorliegenden Berichts mittels des FTK-Simulators durchgeführten nume-



rischen Simulationen allerdings nicht möglich gewesen, Modelle mit *Voronoi*-Diskretisierung zu verwenden. Die mittels des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs in Bezug auf die Durchführung von numerischen Simulationen unter Verwendung des FTK-Simulators hinzugewonnenen Erfahrungen haben allerdings dazu geführt, dass sowohl das quasi-zweidimensionale Streckenmodell wie auch das kombinierte dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell zumindest in der näheren Umgebung der modellierten Hohlraumkonturen im Rahmen der durch die geomechanischen Anforderungen limitierten Möglichkeiten annähernd *Voronoi*-artig diskretisiert worden sind.

Grundsätzlich besteht bezüglich der für die Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen mit dem FTK-Simulator zu verwendenden Modelldiskretisierungen weiterer Untersuchungs- und Entwicklungsbedarf, der jedoch nicht im Rahmen dieses Forschungsvorhabens zu bewältigen gewesen ist.

Bei der Betrachtung der nachfolgend vorgestellten weiteren Berechnungsergebnisse ist somit zu berücksichtigen, dass der vorangehend beschriebene Diskretisierungseinfluss auf die berechneten Porenwasserdruckverteilungen für die im Rahmen der Anfertigung des vorliegenden Berichts mittels des FTK-Simulators durchgeführten numerischen Simulationen vorerst hinzunehmen ist.

Da bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen der im Modellgebiet vorherrschende Porenwasserdruck in jedem einzelnen Berechnungsschritt auch einen Einfluss auf die im Modellgebiet wirkenden mechanischen Kräfte ausübt, ist davon auszugehen, dass auch alle weiteren mit dem FTK-Simulator berechneten Zustandsgrößen – wenn auch gegebenenfalls in gegenüber dem Porenwasserdruck abgeschwächter Form – indirekt durch die Verwendung von nicht *Voronoi*-artigen Modellstrukturen beeinflusst werden. Es ist somit davon auszugehen, dass ein zunächst nicht näher spezifizierbarer Anteil der in den nachfolgenden Ausführungen vorgestellten und diskutierten Ergebnisdifferenzen und relativen Ergebnisabweichungen auf Diskretisierungseffekte zurückzuführen ist.

(d 3) Gegenüberstellung der berechneten Hauptspannungszustände

Nachfolgend werden die mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs generierten Hauptspannungszustände miteinander verglichen. Für den Vergleich der mit den zwei unter-

schiedlichen Simulatoren generierten Hauptspannungszustände werden analog zum Vergleich der generierten Porenwasserdruckzustände in Abschnitt 6.4.3.5(d1) die berechneten Hauptspannungen zunächst in Bild 6.97 im Konturschnitt, in Bild 6.98 im Horizontalschnitt und in Bild 6.99 im Diagonalschnitt gegenübergestellt. Jedes der drei in Bild 6.97 bis Bild 6.99 zu betrachtenden Diagramme enthält jeweils die Zahlenwertegraphen für die mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und die mit dem FTK-Simulator entlang der dargestellten Schnitte generierten größten und kleinsten Hauptspannungen. Anschließend werden in Bild 6.100 und Bild 6.101 die gemäß Gleichung (6.21) in Abschnitt 6.4.3.5(b) berechneten relativen Ergebnisabweichungen für die mit den beiden unterschiedlichen Simulatoren ermittelten kleinsten und größten Hauptspannungen im Flächenplot gegenübergestellt.

In Bild 6.97 erfolgt zunächst die vergleichende Gegenüberstellung der größten und kleinsten Hauptspannungen im Konturschnitt für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs.

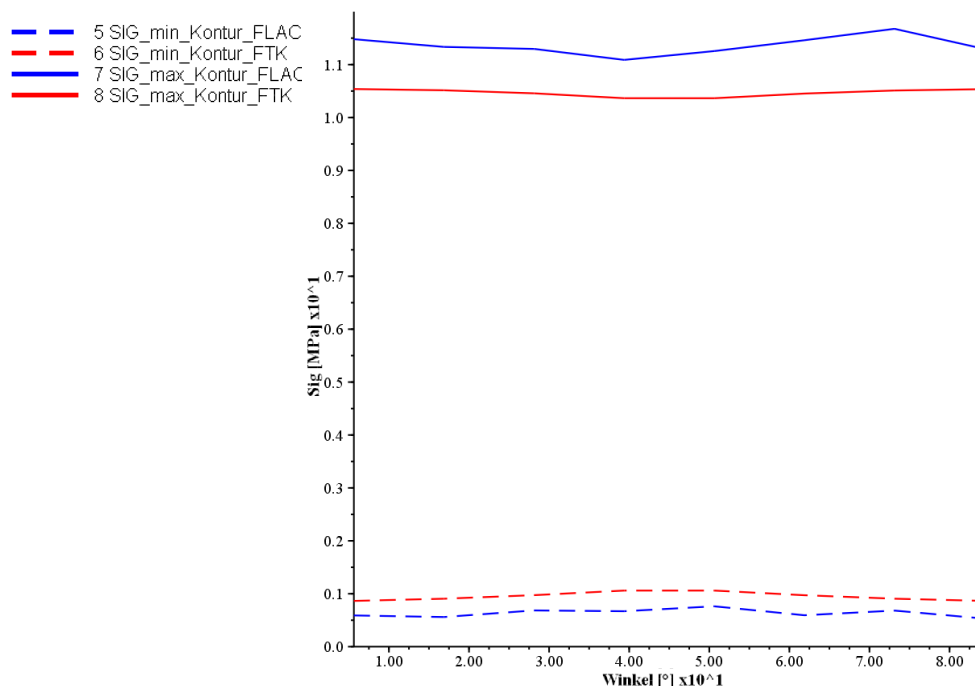


Bild 6.97: Gegenüberstellung der Spannungsverteilung im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs im Konturschnitt (First bei $\varphi = 0^\circ$, Stoß bei $\varphi = 90^\circ$) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blaue Graphen – durchgehende Linie $\rightarrow \sigma_{max}$; gestrichelte Linie $\rightarrow \sigma_{min}$) und dem FTK-Simulator (rote Graphen – durchgehende Linie $\rightarrow \sigma_{max}$; gestrichelte Linie $\rightarrow \sigma_{min}$)



Der in Bild 6.97 dargestellte Konturschnitt beginnt bei einem Winkel von $\varphi = 0^\circ$ an der Bohrlochfirste und verläuft entlang der Kontur des modellierten Viertelbohrlochs bis zum Stoß des Bohrlochs bei $\varphi = 90^\circ$. Die mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Hauptspannungen werden in Bild 6.97 durch die blauen Zahlenwertegraphen repräsentiert, während die unter Verwendung des FTK-Simulators berechneten Hauptspannungen durch die roten Zahlenwertegraphen visualisiert werden. Zur weiteren Differenzierung der Simulationsergebnisse werden die Zahlenwertegraphen der größten Hauptspannungen als durchgehende Linien dargestellt und die Zahlenwertegraphen der kleinsten Hauptspannungen werden in Form von gestrichelten Linien abgebildet.

Bei der Betrachtung von Spannungszuständen im Rahmen der Auswertung einer hydraulisch-mechanisch gekoppelt durchgeführten numerischen Analyse ist es zur korrekten Interpretation der generierten Zustandsgrößen unbedingt erforderlich, zwischen totalen Spannungen und effektiven Spannungen zu differenzieren. Während gemäß der von Terzaghi und Biot entwickelten und den hier durchgeführten Berechnungen zu Grunde liegenden Modellkonzepte die totalen Spannungen diejenigen Spannungen sind, die auf das aus der Gebirgsmatrix und dem wassergefüllten vernetzten Porenraum bestehende kombinierte Tragsystem einwirken, handelt es sich bei den effektiven Spannungen um die ausschließlich in der Gebirgsmatrix wirksamen Spannungen. Gemäß der den im Rahmen der Erstellung dieses Berichts durchgeführten hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Analysen zu Grunde liegenden Modellkonzepte von Terzaghi und Biot sind zur Ermittlung der tatsächlich in der Gebirgsmatrix wirksamen effektiven Spannungen die totalen Spannungen um den durch das innerhalb des vernetzten Porenraumes befindliche Wasser abgetragenen Spannungsanteil zu reduzieren. Bei allen innerhalb des vorliegenden Berichts im Rahmen der Ergebnisanalyse dargestellten Spannungsgrößen handelt es sich um die totalen Spannungen.

Der Betrachtung der Zahlenwertegraphen in Bild 6.97 kann eine grundsätzliche qualitative Übereinstimmung zwischen den mit dem Simulator FLAC^{3D} und den mit dem FTK-Simulator berechneten größten und kleinsten Hauptspannungen entlang der Kontur des Bohrlochs entnommen werden. Allerdings ist ersichtlich, dass für die Berechnungen mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs entlang der Kontur des Bohrlochs keine präzise quantitative Übereinstimmung zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Hauptspannungsverteilungen erzielt werden konnte. Zu aller erst ist auffällig, dass die mittels des FTK-Simulators berechneten kleinsten und

größten Hauptspannungen entlang der Kontur des Bohrlochs einen etwas konstanteren Verlauf aufweisen als die unter Verwendung des Simulators $FLAC^{3D}$ berechneten Hauptspannungen. Für den hier betrachteten Fall eines radialsymmetrischen Hohlraums innerhalb eines homogenen Gebirgsbereiches mit isotropem Primärspannungszustand sollte im Idealfall ein vollständig horizontaler Verlauf der Zahlenwertegraphen im Konturschnitt unabhängig von der Wahl des einzusetzenden Simulators erreicht werden. Die Schwankungen der in Bild 6.97 zu betrachtenden Zahlenwertegraphen sind somit nicht auf geomechanische oder geohydraulische Ursachen zurückzuführen. Es liegt daher die Vermutung nahe, dass die bei der Betrachtung von Bild 6.97 zu erkennenden leichten Schwankungen der dargestellten Zahlenwertegraphen auf numerische Effekte zurückzuführen sind.

Quantitativ unterscheiden sich die in Bild 6.97 dargestellten Zahlenwertegraphen in Bezug auf den Verlauf der kleinsten Hauptspannungen entlang der Bohrlochkontur dahingehend, dass die mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ generierten Zahlenwerte im Mittel nahe eines Zahlenwerts von $\sigma_{min} = 0,6$ MPa liegen, während die mittels des FTK-Simulators ermittelten Zahlenwerte um einen durchschnittlichen Zahlenwert von $\sigma_{min} = 1,0$ MPa herum schwanken.

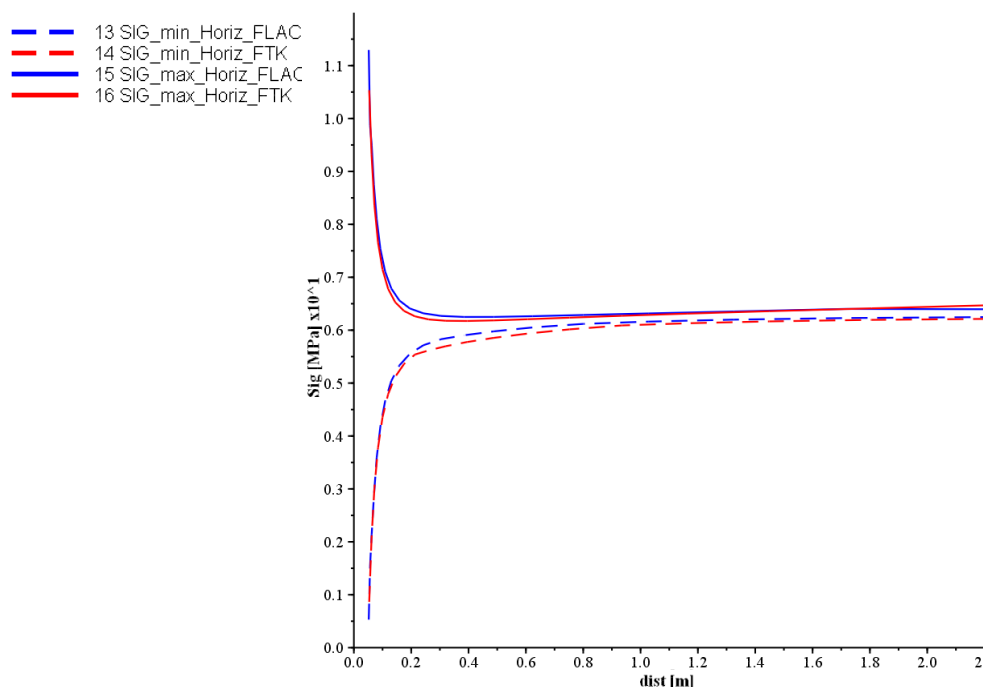


Bild 6.98: Gegenüberstellung der Spannungsverteilung im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs im Horizontalschnitt für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blaue Graphen – durchgehende Linie $\rightarrow \sigma_{max}$; gestrichelte Linie $\rightarrow \sigma_{min}$) und dem FTK-Simulator (rote Graphen – durchgehende Linie $\rightarrow \sigma_{max}$; gestrichelte Linie $\rightarrow \sigma_{min}$)

Die mit dem Simulator FLAC^{3D} ermittelten größten Hauptspannungen weisen entlang der Bohrlochkontur einen durchschnittlichen Zahlenwert von $\sigma_{\max} = 11,5$ MPa auf. Im Rahmen der Berechnungen mit dem FTK-Simulator wird ein derart großer Durchschnittswert für die größten Hauptspannungen nicht erreicht. Die im Rahmen der Berechnungen mittels des FTK-Simulators für die Zonen unmittelbar an der Bohrlochkontur ermittelten Hauptspannungen liegen durchschnittlich bei einem Zahlenwert von $\sigma_{\max} \approx 10,5$ MPa.

Auf Basis einer optischen Betrachtung als präziser übereinstimmend einzustufende Verläufe weisen die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten größten und kleinsten Hauptspannungen in dem in Bild 6.98 dargestellten Horizontalschnitt sowie in dem in Bild 6.99 zu betrachtenden Diagonalschnitt auf.

Deutlich auf Basis der optischen Begutachtung erkennbare Differenzen ergeben sich für die in Bild 6.98 und Bild 6.99 dargestellten Zahlenwertgraphen ausschließlich im unmittelbar an der Bohrlochkontur gelegenen Gebirgsbereich. Bezüglich der größten Hauptspannungen kann

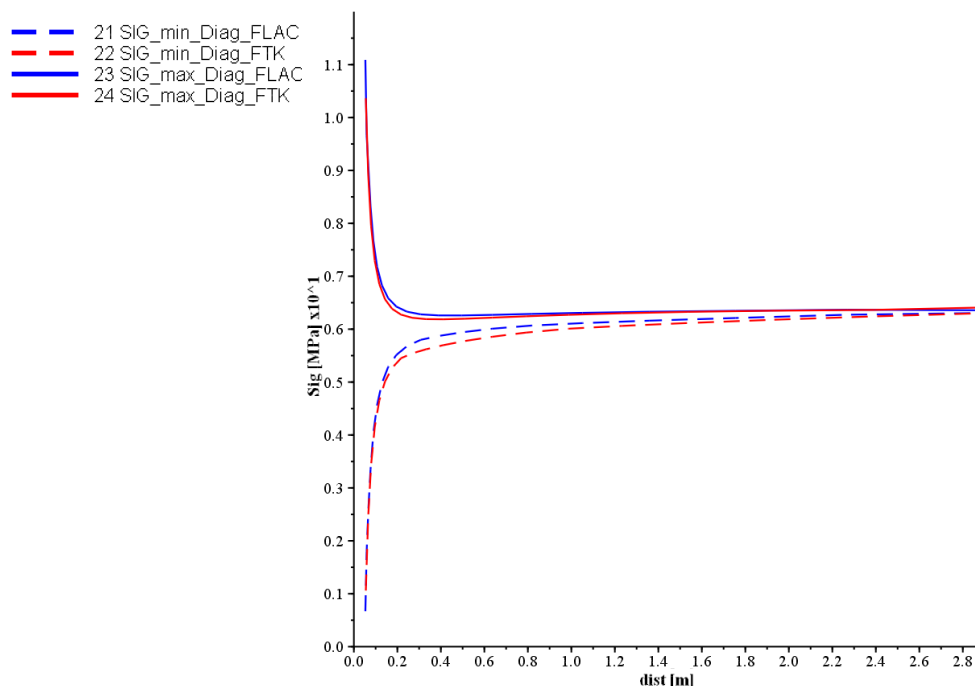


Bild 6.99: Gegenüberstellung der Spannungsverteilung im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs im Diagonalschnitt für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator FLAC^{3D} (blaue Graphen – durchgehende Linie → σ_{\max} ; gestrichelte Linie → σ_{\min}) und dem FTK-Simulator (rote Graphen – durchgehende Linie → σ_{\max} ; gestrichelte Linie → σ_{\min})

für die tiefer im Gebirge gelegenen Bereiche sowie für den Gebirgsbereich unmittelbar am Modellrand ein nahezu identischer Verlauf der Zahlenwertegraphen der mit dem Simulator FLAC^{3D} und der mit dem FTK-Simulator berechneten Simulationsergebnisse sowohl im Horizontalschnitt wie auch im Diagonalschnitt festgestellt werden. Für die Verläufe der Zahlenwertegraphen der minimalen Hauptspannungen ist anzumerken, dass sowohl im Horizontalschnitt wie auch im Diagonalschnitt die mit dem FTK-Simulator berechneten Zahlenwerte geringfügig unterhalb der mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Zahlenwerte liegen.

Ein detaillierterer Überblick bezüglich der Abweichungen zwischen den unter Verwendung der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Hauptspannungen kann der nachfolgenden Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen in Bild 6.100 und Bild 6.101 entnommen werden. Der in Bild 6.100 zu betrachtende Flächenplot zeigt die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der minimalen Hauptspannungen und in Bild 6.101 sind die relativen Ergebnisabweichungen, die sich durch die Anwendung der beiden unterschiedlichen Simulatoren für die maximale Hauptspannungsverteilung ergeben, dargestellt.

Passend zu dem bei der Betrachtung der Hauptspannungsverläufe in den Schnittdarstellungen in Bild 6.97 bis Bild 6.99 zu gewinnenden Eindruck lässt sich Bild 6.100 und Bild 6.101 entnehmen, dass die größten relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator FLAC^{3D} und mit dem FTK-Simulators berechneten größten und kleinsten Hauptspannungen im Gebirgsbereich unmittelbar an der Kontur des Bohrlochs sowie wenige Zonen von der Bohrlochkontur entfernt in das Gebirge hinein auftreten. Für die in Bild 6.100 zu betrachtenden relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die minimalen Hauptspannungen ergibt sich ein Zahlenwertebereich von $-8,1 \% \leq \Delta_{\text{rel}} \leq 3,0 \%$. Hierbei ist auffällig, dass in der Nähe der Bohrlochkontur Zonen, in denen die mit dem FTK-Simulator berechneten minimalen Hauptspannungen deutlich größer sind als die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten minimalen Hauptspannungen, zum Teil unmittelbar neben solchen Zonen liegen, in denen die mit dem FTK-Simulator berechneten minimalen Hauptspannungen erheblich kleiner sind als die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten minimalen Hauptspannungen. Die gesamte Bandbreite des Zahlenwertebereichs der relativen Ergebnisabweichungen erstreckt sich somit nicht flächenhaft über das gesamte Modell, sondern sie beschränkt sich in ihrer flächenmäßigen Ausdehnung auf den in der unmittelbaren Nähe der Bohrlochkontur gelegenen Modellbereich.

Ein identischer Befund, wie er für die relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die minimalen Hauptspannungen gestellt werden kann, lässt sich ebenfalls für die relativen Ergeb-

nisabweichungen zwischen den mit den beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten maximalen Hauptspannungen feststellen, wie Bild 6.101 entnommen werden kann. Der Zahlenwertebereich für die relativen Abweichungen bezüglich der maximalen Hauptspannungen

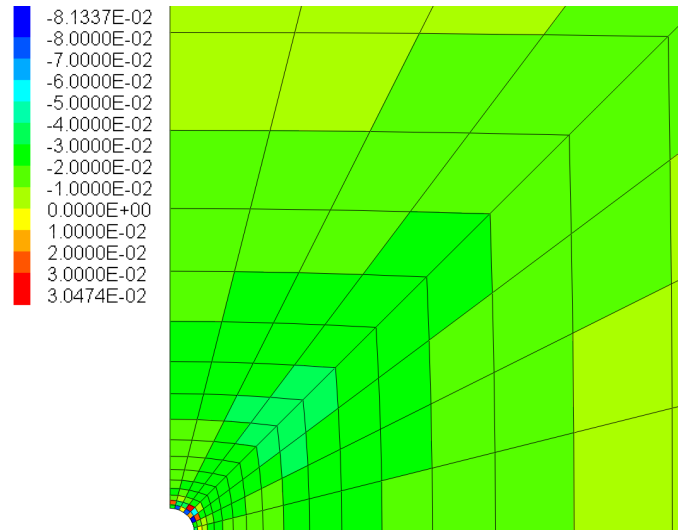


Bild 6.100: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator für den stationären Zustand berechneten Minimalspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Minimalspannungsabweichungen bezogen auf den von $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

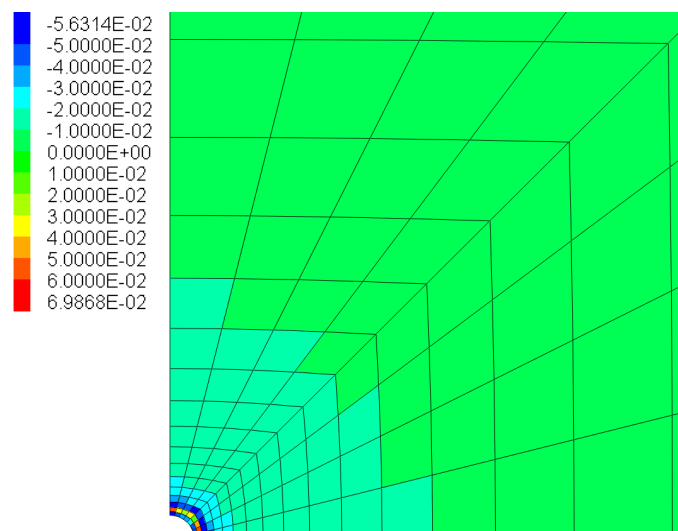


Bild 6.101: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator für den stationären Zustand berechneten Maximalspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Maximalspannungsabweichungen bezogen auf den von $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

beträgt $-5,6 \% \leq \Delta_{\text{rel}} \leq 7,0 \%$ und befindet sich somit in derselben Größenordnung wie der Zahlenwertebereich, der für die relativen Abweichungen bezüglich der minimalen Hauptspannungen ermittelt worden ist.

(d 4) *Gegenüberstellung der berechneten Matrixausnutzungsgrade*

Die bisher untersuchten Zustandsgrößen *Porenwasserdruck*, *minimale Hauptspannung* und *maximale Hauptspannung* stellen die Grundlage zur Berechnung der Matrixausnutzungsgrade unter Bezug auf das Mohr-Coulomb'sche Bruchkriterium dar. Der Ausnutzungsgrad der Gesteinmatrix ist einer der wichtigsten Parameter bei der Bewertung der Standsicherheit eines untertägigen Tragwerks sowie ebenfalls bei der Auswahl und Dimensionierung der Ausbaumaßnahmen für ein zukünftig zu errichtendes untertägiges Tragwerk. Aufgrund der Signifikanz des Parameters *Matrixausnutzungsgrad* bei der Bewertung der Standsicherheit und Dimensionierung von untertägigen Tragwerken ist im Rahmen der Erstellung des vorliegenden Berichts zusätzlich zu den bisher vorgestellten durchgeführten Ergebnisvergleichen ebenfalls

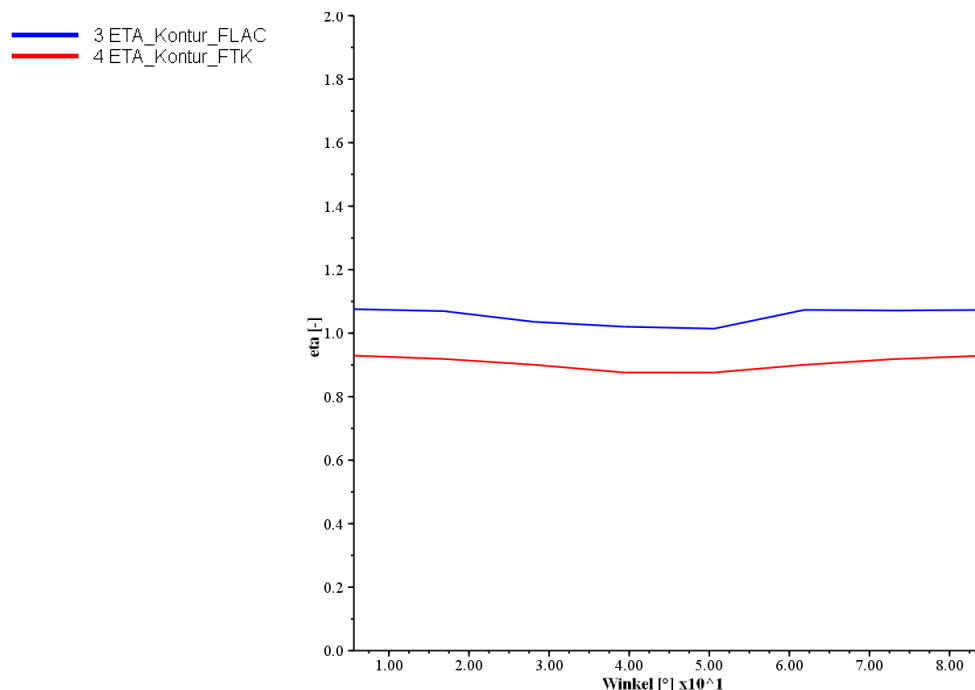


Bild 6.102: *Gegenüberstellung der Matrixausnutzungsgrade im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs im Konturschnitt (First bei $\varphi = 0^\circ$, Stoß bei $\varphi = 90^\circ$) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator FLAC^{3D} (blauer Graph) und dem FTK-Simulator (roter Graph)*

ein Vergleich der auf Basis der mit den beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Zustandsgrößen berechneten Matrixausnutzungsgrade vorgenommen worden. Bild 6.102 zeigt zunächst die im Konturschnitt auf Basis der Berechnung mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Matrixausnutzungsgrade im Vergleich zu den auf Basis der Berechnung mit dem FTK-Simulator ermittelten Matrixausnutzungsgraden.

Die auf Basis der Berechnungen mit den beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Matrixausnutzungsgrade weisen für den Konturschnitt grundsätzlich ähnliche Verläufe auf. Allerdings zeigen die in Bild 6.102 durch den roten Zahlenwertegraphen repräsentierten, mit dem FTK-Simulator berechneten Matrixausnutzungsgrade insgesamt etwas geringere Zahlenwerte entlang der Kontur des Bohrlochs als die durch den blauen Zahlenwertegraphen dargestellten und mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Matrixausnutzungsgrade. Entlang der Kontur des Bohrlochs liegen die mit dem FTK-Simulator berechneten Matrixausnutzungsgrade durchschnittlich in etwa bei einem Zahlenwert von $\eta_M = 0,95$, während die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Zahlenwerte durchschnittlich in etwa einen Zahlenwert von $\eta_M = 1,05$ erreichen.

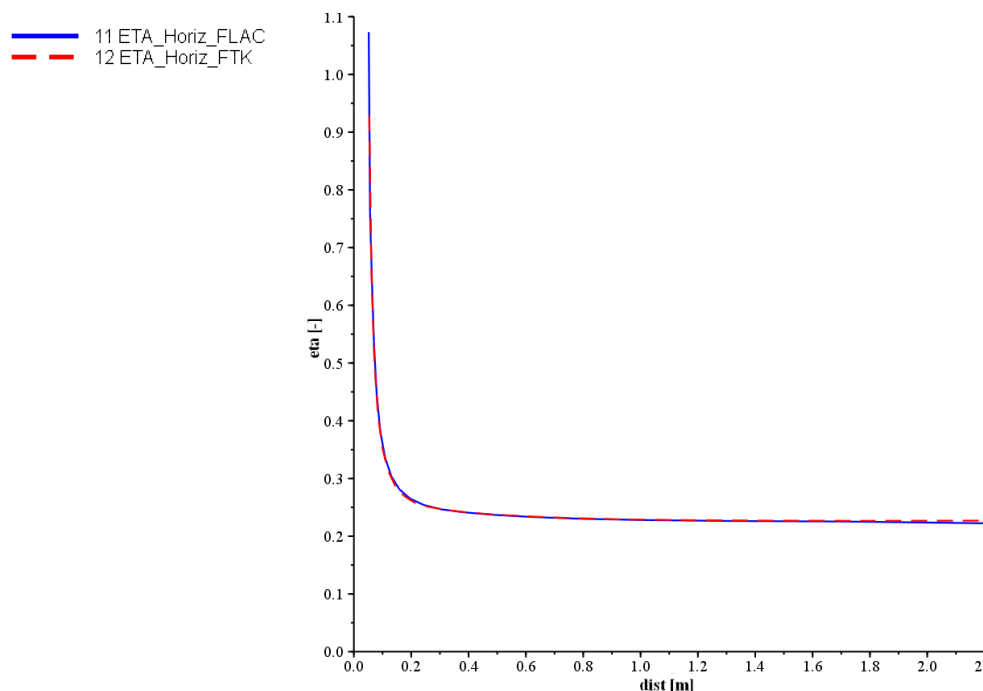


Bild 6.103: Gegenüberstellung der Matrixausnutzungsgrade im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs in einem Horizontalschnitt für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator FLAC^{3D} (blauer Graph) und dem FTK-Simulator (roter Graph)

In Bild 6.103 und Bild 6.104 sind die mit den beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Matrixausnutzungsgrade in einem Horizontalschnitt sowie in einem Diagonalschnitt gegenübergestellt. Den beiden in Bild 6.103 und Bild 6.104 zu betrachtenden Diagrammen ist zu entnehmen, dass, wie es auch schon für die minimalen und die maximalen Hauptspannungen der Fall gewesen ist, größere Differenzen in Bezug auf die mittels der unterschiedlichen Simulatoren berechneten Matrixausnutzungsgrade ausschließlich im unmittelbar an der Bohrlochkontur gelegenen Gebirgsbereich identifiziert werden können. Allerdings wird deutlich, dass zufällig in dem einen Fall für das Gebirge an der Kontur die Standfestigkeit gerade noch gegeben ist, während im anderen Fall schon von einem Konturbruchversagen auszugehen wäre (keine Sicherheitsmargen, keine zeitliche Betrachtung). Hier zeigt sich auch die Notwendigkeit, im Rahmen der Tragwerksplanung mögliche Streubreiten von nachweisrelevanten Zustandsgrößen zu identifizieren und Streubreiten – hier numerisch bedingt – durch angemessene Sicherheitsmargen abzudecken.

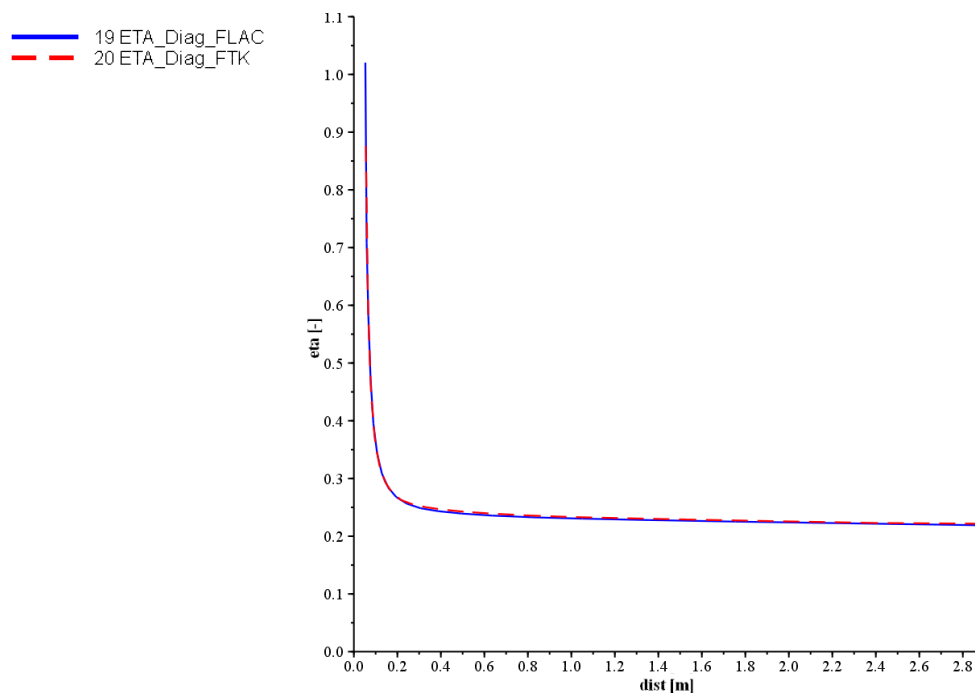


Bild 6.104: Gegenüberstellung der Matrixausnutzungsgrade im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs in einem Diagonalschnitt für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blauer Graph) und dem FTK-Simulator (roter Graph)

Für die weiter in das Gebirge hineinreichenden Bereiche bis hin zu den Modellrändern kann sowohl dem Horizontalschnitt in Bild 6.103 wie darüber hinaus auch dem Diagonalschnitt in

Bild 6.104 eine sehr präzise Übereinstimmung der mit dem FTK-Simulator und der mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Matrixausnutzungsgrade entnommen werden. In Bild 6.105 sind zusätzlich zu den zuvor in Bild 6.102 bis Bild 6.104 zu betrachtenden Schnittdarstellungen zur besseren Visualisierung der Ergebnisdifferenzen die relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die Matrixausnutzungsgrade in einem Flächenplot dargestellt.

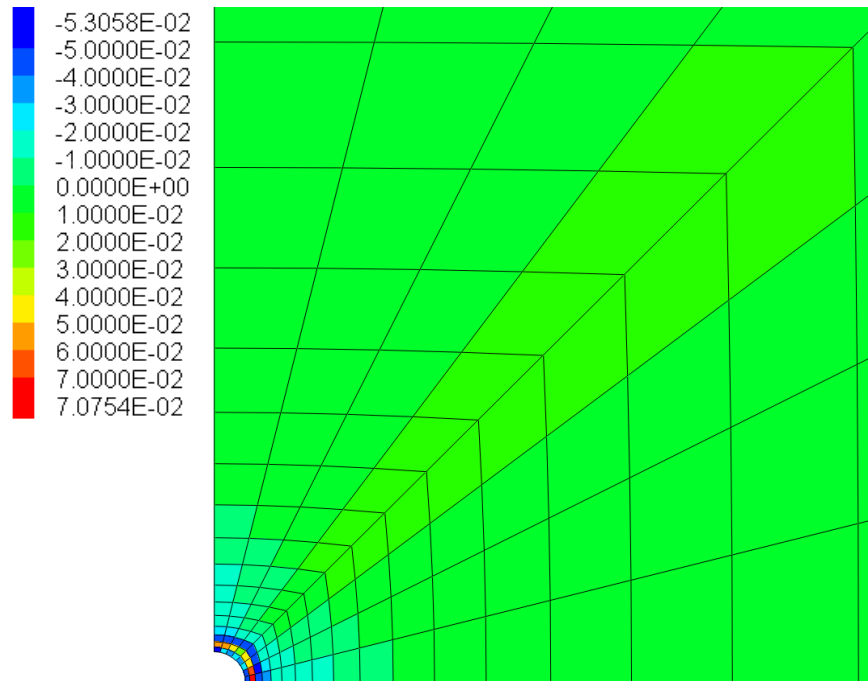


Bild 6.105: Relative Ergebnisabweichung in Bezug auf die mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und die mit dem FTK-Simulator für den stationären Zustand berechneten Matrixausnutzungsgrade – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Abweichung zwischen den Matrixausnutzungsgraden bezogen auf den von $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

Mit Zahlenwerten der relativen Matrixausnutzungsgradabweichung in einem Zahlenwertebereich von $-5,3 \% \leq \Delta_{rel} \leq 7,1 \%$ liegen die berechneten relativen Abweichungen in Bezug auf die Matrixausnutzungsgrade in etwa in der selben Größenordnung wie die in Bild 6.101 zu betrachtenden, für die größten Hauptspannungen berechneten relativen Ergebnisabweichungen. In Übereinstimmung mit der bei der Betrachtung der Schnittdarstellungen in Bild 6.102 bis Bild 6.104 gewonnenen Erkenntnis ist Bild 6.105 zu entnehmen, dass die größten relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die Matrixausnutzungsgrade innerhalb der unmittelbar an der Bohrlochkontur gelegenen Zonen sowie innerhalb der Zonen in der näheren Umgebung der Bohrlochkontur vorliegen.



(d 5) *Gegenüberstellung der berechneten Radialverschiebungen*

Bedingt durch die sich in der Umgebung eines untertägigen Hohlraums nach dessen Ausbruch einstellenden Spannungsumlagerungen kommt es nach dem Ausbruch eines untertägigen Hohlraums in dessen Umgebung und insbesondere unmittelbar an der Kontur des Hohlraums zu Deformationen des Gebirges. Die Deformationen des Gebirges manifestieren sich unter anderem in Radialverschiebungen an der Hohlraumkontur. Die Radialverschiebungen werden im Bereich der Geomechanik als Indikator für die Intensität der im Gebirge nach dem Ausbruch des Hohlraums ablaufenden Prozesse messtechnisch zeitabhängig erfasst und ausgewertet, um gegebenenfalls im Fall konstant anhaltender oder sogar zunehmender Verschiebungsraten der Hohlraumkontur ingenieurtechnisch intervenieren zu können und so einer Auflockerung des Gebirges in der Umgebung der Hohlraumkontur mit der drohenden Folge eines Konturverbruchs vorbeugen zu können.

Aufgrund der Relevanz, die den Gebirgsdeformationen und insbesondere den Konturverschiebungen von untertägigen Hohlräumen bei der Standsicherheitsbewertung und bei der Ausbaudimensionierung zukommt, ist es im Rahmen eines möglichst umfassenden Ergebnisvergleiches notwendig gewesen, auch die beiden Faktoren *Radialverschiebungen der Bohrlochkontur* und *Volumenverzerrungen* zu untersuchen. Während im nachfolgenden Abschnitt 6.4.3.5(d6) die Unterschiede zwischen den mit den beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Volumenverzerrungen für eine ausgewählte Zone an der Bohrlochkontur aufgezeigt werden, erfolgt im vorliegenden Abschnitt zunächst in Bild 6.106 die vergleichende Gegenüberstellung der mit dem FTK-Simulator und mittels des Simulators FLAC^{3D} berechneten radialen Konturverschiebung entlang des Konturschnitts.

Die Betrachtung von Bild 6.106 zeigt eine große Übereinstimmung zwischen den durch den blauen Zahlenwertgraphen repräsentierten und mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten radialen Konturdeformationen und den durch den gestrichelten roten Zahlenwertgraphen repräsentierten und mit dem FTK-Simulator berechneten radialen Konturdeformationen. Die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten radialen Konturverschiebungen liegen entlang der gesamten Bohrlochkontur sehr nah bei einem Zahlenwert von $u_r = 0,078$ mm.

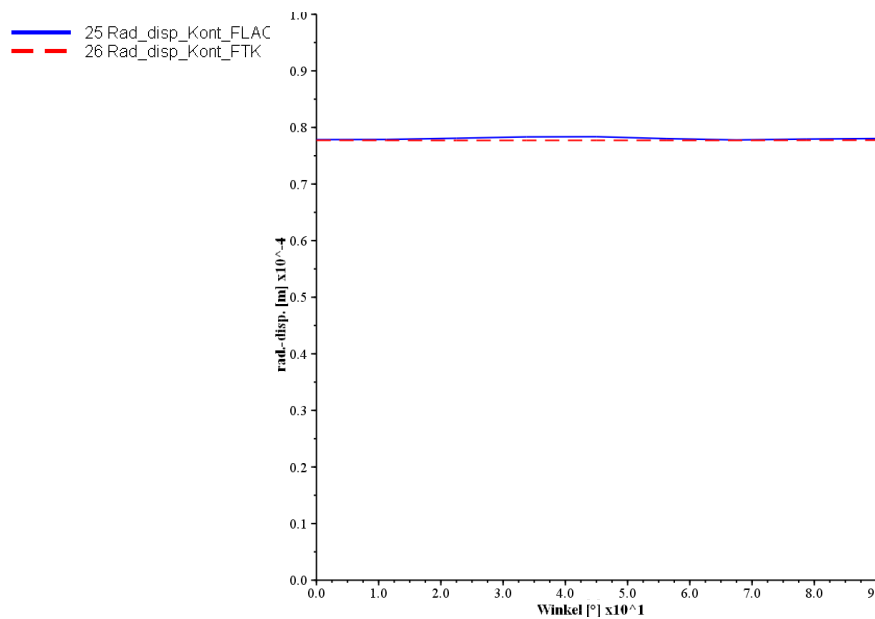


Bild 6.106: Gegenüberstellung der Radialverschiebungen der Bohrlochkontur im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs im Konturschnitt (First bei $\varphi = 0^\circ$, Stoß bei $\varphi = 90^\circ$) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blauer Graph) und dem FTK-Simulator (gestrichelter roter Graph)

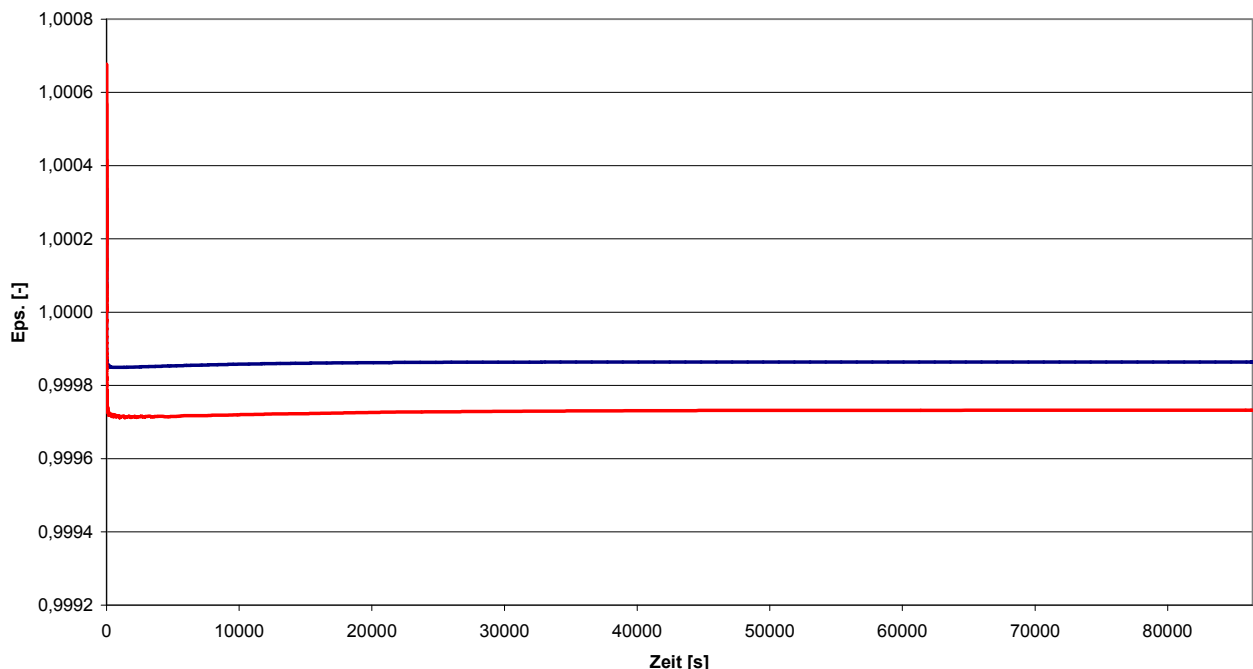


Bild 6.107: Gegenüberstellung der während des gesamten Berechnungslaufes mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator berechneten Volumenverzerrungen der Firstzone – Die dargestellten Zahlenwerte beziehen sich auf das Ausgangsvolumen des Firstelementes, Der rote Graph stellt die vom FTK-Simulator berechneten Zahlenwerte dar. Die vom Simulator $FLAC^{3D}$ ermittelten Zahlenwerte werden durch den blauen Graph repräsentiert.

(d 6) *Gegenüberstellung der berechneten Volumenverzerrungen*

Bild 6.107 zeigt die Gegenüberstellung der mit dem Simulator FLAC^{3D} und der mit dem FTK-Simulator berechneten Volumenverzerrungen für die unmittelbar oberhalb des Bohrlochfirstes gelegene Gebirgszone.

Die in Bild 6.107 dargestellten Zahlenwertgraphen zeigen die Entwicklung der Volumenverzerrungen über den gesamten, einen Tag lang andauernden Simulationszeitraum für die Berechnung mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs. Zur Darstellung der Volumenverzerrungen ist in jedem Zeitschritt der durchgeführten Berechnung die Volumenverzerrung bezogen auf das Ausgangsvolumen der Zone gemäß Gleichung (6.22) berechnet worden:

$$\varepsilon_{vol} = \frac{Vol_1}{Vol_2} \quad (6.22)$$

mit

ε_{vol} Volumenverzerrung, dimensionslos,

Vol_1 aktuelles Zonenvolumen in m^3 ,

Vol_2 Ausgangsvolumen der Zone in m^3 .

Der vergleichenden Betrachtung der beiden Zahlenwertgraphen ist zu entnehmen, dass die mit dem Simulator FLAC^{3D} und die mit dem FTK-Simulator berechneten Volumenverzerrungen sich mit Zahlenwerten im Bereich von $\varepsilon_{vol} \approx 0,99973$ für die mit dem FTK-Simulator berechneten Volumenverzerrungen und $\varepsilon_{vol} \approx 0,99987$ für die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Volumenverzerrungen nur marginal voneinander unterscheiden. Die relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Volumenverzerrungen für die Firstzone des Bohrlochs ergeben sich auf Basis der den Zahlenwertgraphen in Bild 6.107 zu entnehmenden Zahlenwerte näherungsweise zu $\Delta_{rel} \approx -0,014 \%$.

(e) *Schlussfolgerungen*

Grundsätzlich ist festzuhalten, dass für die mechanisch-hydraulisch gekoppelten numerischen Simulationen, die mittels des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs unter Verwendung des Simulators FLAC^{3D} sowie unter Verwendung des

FTK-Simulators durchgeführt worden sind, eine gute Übereinstimmung zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Berechnungsergebnissen festgestellt werden konnte. Für alle im Rahmen des Ergebnisvergleichs betrachteten Zustandsgrößen liegen die berechneten relativen Ergebnisabweichungen innerhalb eines Zahlenwertebereiches von $-10 \% \leq \Delta_{\text{rel}} \leq 10 \%$.

Die größte Bandbreite in den für die untersuchten Zustandsgrößen berechneten relativen Ergebnisabweichungen ist bezüglich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Porenwasserdruckverteilungen identifiziert worden. Die relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem FTK-Simulator und mit dem Simulator FLAC^{3D} für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs berechneten Simulationsergebnissen bewegen sich im Zahlenwertebereich von $-8,5 \% \leq \Delta_{\text{rel}} \leq 7,0 \%$.

Die wahrscheinlich wichtigste Erkenntnis aus dem durchgeführten Ergebnisvergleich lässt sich aus der Analyse der relativen Porenwasserdruckabweichungen im Flächenplot in Bild 6.92 ableiten. Der Flächenplot in Bild 6.92 zeigt die systematische Anordnung der relativen Porenwasserdruckabweichungen, wonach in den Gebirgsbereichen, die ausgehend von der Bohrlochkontur vertikal und horizontal in das Gebirge hineinreichen, die mit dem FTK-Simulator generierten Porenwasserdrücke deutlich oberhalb der mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdrücke liegen, während in dem Gebirgsbereich, der ausgehend von der Bohrlochkontur unter $\alpha = 45^\circ$ schräg nach oben in das Gebirge hinein verläuft, die mit dem FTK-Simulator generierten Porenwasserdrücke signifikant unterhalb der mit dem Simulator FLAC^{3D} ermittelten Porenwasserdrücke liegen.

Im Rahmen des vorangehend in diesem Abschnitt beschriebenen Ergebnisvergleiches ist aufgezeigt worden, dass zu einem großen Teil die in FLAC^{3D} fehlende (weil dort nicht benötigte) Möglichkeit der Generierung einer Diskretisierung mit *Voronoi*-Struktur für die systematischen Unterschiede bezüglich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Porenwasserdruckverteilungen verantwortlich ist. Als wichtiger Schritt für die Weiterentwicklung des FTK-Simulators ist somit die Integration einer Möglichkeit zum Umgang mit nicht *Voronoi*-artigen Diskretisierungsstrukturen identifiziert worden. Da im Rahmen einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Analyse die berechnete Porenwasserdruckverteilung auch einen großen Einfluss auf die weiteren und im vorliegenden Abschnitt auch näher untersuchten Zustandsgrößen ausübt, wäre dann im Anschluss an die Weiterentwicklung des FTK-Simulators zu überprüfen, inwieweit die festgestellten Ergebnisabwei-

chungen zwischen den weiteren untersuchten Zustandsgrößen wie beispielsweise den minimalen und maximalen Hauptspannungen auf die fehlende *Voronoi*-Struktur der verwendeten Modelldiskretisierung zurückzuführen sind oder inwieweit noch weitere, bisher nicht identifizierte Faktoren für die festzustellenden Ergebnisunterschiede verantwortlich sind.

6.4.3.6 Dreidimensionale Simulation zum Abteufen eines Bohrlochs

(a) Grundsätzliche Anmerkungen

Im vorangehenden Abschnitt 6.4.3.5 ist zunächst erfolgreich ein Beitrag zur Validierung des neu entwickelten FTK-Simulators anhand des Vergleichs der vom FTK-Simulator generierten Berechnungsergebnisse mit den vom renommierten kommerziellen Simulator FLAC^{3D} generierten Berechnungsergebnissen geleistet worden. Für die numerischen Simulationen ist das quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs herangezogen worden. Im vorliegenden Abschnitt werden nunmehr die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren für den ungleich komplexeren Fall der dreidimensionalen Simulation des Abteufens eines Bohrlochs generierten Simulationsergebnisse vergleichend gegenübergestellt. Die nachfolgend in diesem Abschnitt vorgestellten Simulationsergebnisse sind unter Verwendung des in Abschnitt 6.4.3.1 in Bild 6.75 dargestellten dreidimensionalen Viertelbohrlochmodells erhalten worden.

Im Rahmen der vergleichenden Ergebnisgegenüberstellung für die dreidimensionale Simulation des Abteufens eines Bohrlochs werden in den nachfolgenden Abschnitten nicht mehr alle relevanten berechneten Zustandsgrößen betrachtet, wie es im vorangehenden Abschnitt für den Fall der Simulation mittels des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs erfolgt ist. Vielmehr erfolgt mit Rücksicht auf den zu erwartenden Umfang der Ergebnisgegenüberstellung für diesen Fall eine Beschränkung auf die Darstellung der Resultate des Ergebnisvergleichs für die beiden Zustandsgrößen *Porenwasserdruck* und *maximale Hauptspannungen*.

Die Reduzierung auf diese zwei im Rahmen des durchgeführten Ergebnisvergleiches als besonders signifikant erachteten Zustandsgrößen erlaubt es, einen Vergleich der mit dem Simulator FLAC^{3D} und mit dem FTK-Simulator berechneten Zustandsgrößen nicht nur, wie es im vorangehenden Abschnitt bezüglich der unter Anwendung des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs generierten Resultate erfolgt ist, für die

im stationären Strömungszustand ermittelten Simulationsergebnisse durchzuführen, sondern auch für weitere ausgewählte Simulationszeitpunkte einen Vergleich der Berechnungsergebnisse vorzunehmen. Bei der Durchführung des im vorangehenden Abschnitt dokumentierten Ergebnisvergleiches für die mittels des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs generierten Berechnungsergebnisse hat sich, wie vorangehend bereits in Abschnitt 6.4.3.5(d1) beschrieben worden ist, herausgestellt, dass die Darstellung von relativen Ergebnisabweichungen in Form von Flächenplots eine aussagekräftigere Möglichkeit zum Vergleich von unter Verwendung der zwei unterschiedlichen Simulatoren berechneten Zustandsgrößen darstellt als die vergleichende Gegenüberstellung von Zahlenwertegraphen, die den Verlauf der berechneten Zustandsgrößen entlang von definierten Schnitten durch das Modell repräsentieren. Daher ist der nachfolgend im vorliegenden Abschnitt dokumentierte Ergebnisvergleich für die beiden ausgewählten Zustandsgrößen *Porenwasserdruck* und *maximale Hauptspannungen* auch anhand der Visualisierung relativer Zustandsgrößendifferenzen in Form von Flächenplots erfolgt.

Im Rahmen der numerischen Simulationen, die mittels des dreidimensionalen Bohrlochmodells durchgeführt worden sind, ist bei den hier vorliegenden Materialkennwerten insbesondere zur Gebirgsdurchlässigkeit bereits 24 Stunden nach Beginn der Simulation des Bohrlochabteufens ein stationärer Strömungszustand ermittelt worden.

Insgesamt ist im Rahmen der mittels des dreidimensionalen Bohrlochmodells durchgeführten numerischen Simulationsarbeiten das Abteufen eines $l_{BL} = 1$ m langen Bohrlochabschnitts über einen Zeitraum von $t_T = 1$ Stunde mit anschließender $t_S = 23$ Stunden lang andauernder Strömungsphase simuliert worden. Im Rahmen des Ergebnisvergleiches werden im vorliegenden Abschnitt die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Zustandsgrößen zu insgesamt sieben innerhalb des 24-stündigen Simulationszeitraumes gelegenen Simulationszeitpunkten miteinander verglichen. Vier der betrachteten Vergleichszeitpunkte liegen dabei innerhalb der ersten Stunde des Simulationszeitraums, in der das Abteufen des Bohrlochabschnitts simuliert worden ist, während drei weitere Vergleichszeitpunkte innerhalb des im Anschluss an die Simulation des Abteufens simulierten 23-stündigen Zeitraums liegen, in dem die an den Anschluss des Abteufens erfolgte Strömungsphase bis zum Erreichen des stationären Strömungszustands simuliert worden ist. Die genauen Simulationszeitpunkte, zu denen die Ergebnisvergleiche durchgeführt worden sind, sowie der zum jewei-

ligen Vergleichszeitpunkt gehörige Stand des Bohrlochtiefsten können Tabelle 6.9 entnommen werden.

Zeitpunkt-Nr.	Simulationszeit [s]	Teufe [m]	Abschlag [-]
1	1080	0,3	3
2	2236	0,621	8
3	3025	0,84	18
4	3600	1,00	26
5	7200	1,00	26
6	28800	1,00	26
7	86400	1,00	26

Tabelle 6.9: Übersicht über die 7 im Rahmen des Ergebnisvergleichs betrachteten Simulationszeitpunkte mit der dazugehörigen Simulationszeit in Sekunden, der Position des Bohrlochtiefsten (Teufe[m]) und der Anzahl der ausgebrochenen Elementreihen (Abschlag)

In Abschnitt 6.4.3.6(b) erfolgt zunächst der Vergleich der berechneten Porenwasserdruckverteilungen anhand der grafischen Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen zu den in Tabelle 6.9 zu betrachtenden Vergleichszeitpunkten, bevor in Abschnitt 6.4.3.6(c) dem identischen Schema folgend der Vergleich für die mit dem Simulator FLAC^{3D} und die mit dem FTK-Simulator berechneten maximalen Hauptspannungen erfolgt.

(b) Vergleich der berechneten Porenwasserdruckverteilungen

Bild 6.108 zeigt zunächst die für das dreidimensionale Bohrlochmodell mit dem FTK-Simulator berechnete Porenwasserdruckverteilung im stationären Zustand 23 Stunden nach dem Abschluss der Simulation des Abteufens des $l_{BL} = 1$ m langen Bohrlochabschnitts. An der Vorderseite des Modells kann die in ihrer flächenhaften Ausdehnung nicht radialsymmetrische Porenwasserdruckverteilung betrachtet werden, wie sie auch für die unter Verwendung des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs generierten Simulationsergebnisse beobachtet und im vorangehenden Abschnitt 6.4.3.5 beschrieben worden ist. Der Betrachtung von Bild 6.108 ist zu entnehmen, dass der Porenwasserdruckabsenktrichter im stationären Zustand mit zunehmender Bohrlochteufe in seiner flächenmäßigen Ausdehnung kleiner wird. Die Verkleinerung des Porenwasserdruckabsenktrichters mit zunehmender Bohrlochteufe in Richtung des Bohrlochtiefsten ist darauf zurückzuführen, dass

bei der dreidimensionalen Simulation der um das Bohrloch herum ablaufenden Strömungsprozesse im Gegensatz zur Strömungssimulation mit dem quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodell eines Bohrlochs auch ein Nachströmen von Gebirgswasser aus dem hinter dem Bohrlochtiefsten gelegenen Gebirgsbereich simuliert wird. Die vergleichende Betrachtung von Bild 6.108 und Bild 6.91 in Abschnitt 6.4.3.5 verdeutlicht somit den Unterschied zwischen einer zweidimensionalen und einer dreidimensionalen hydraulisch-mechanisch gekoppelt durchgeführten numerischen Simulation in Bezug auf die im stationären Zustand berechneten Porenwasserdruckverteilungen.

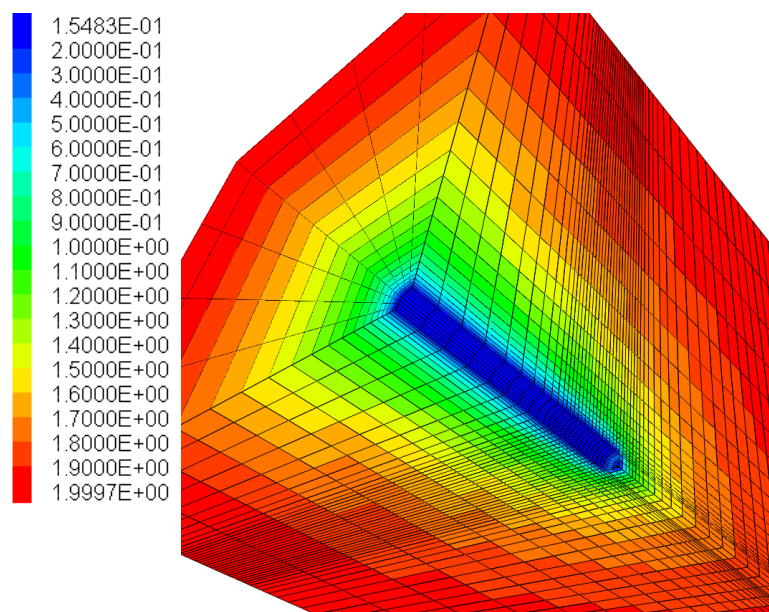


Bild 6.108: Porenwasserdruckverteilung im stationären Zustand für das dreidimensionale Bohrlochmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an

Der nachfolgend in Bild 6.109 bis Bild 6.115 dargestellten Serie von Flächenplots können die relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Porenwasserdrücke zu den in Tabelle 6.9 aufgeführten Simulationszeitpunkten entnommen werden.

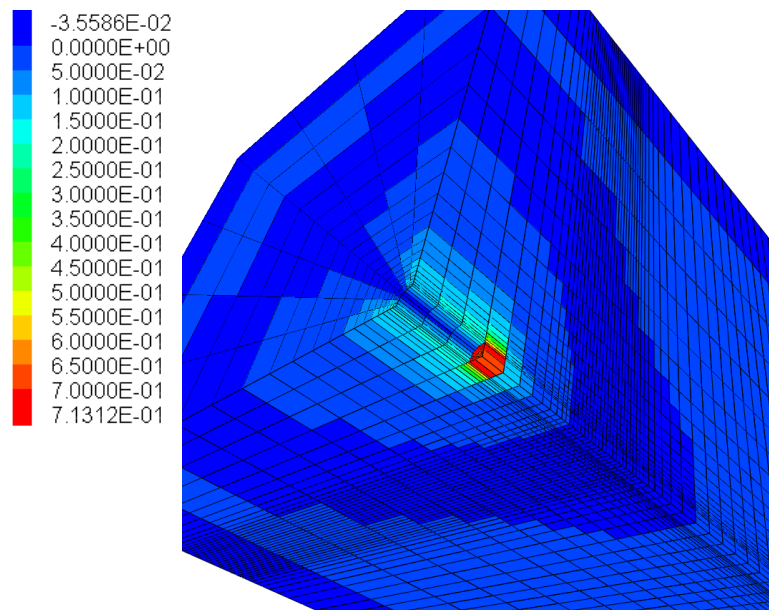


Bild 6.109: Vergleichszeitpunkt 1: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator für den Vortrieb nach dem Ausbruch der dritten Elementreihe berechneten Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die Porenwasserdruckabweichung bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

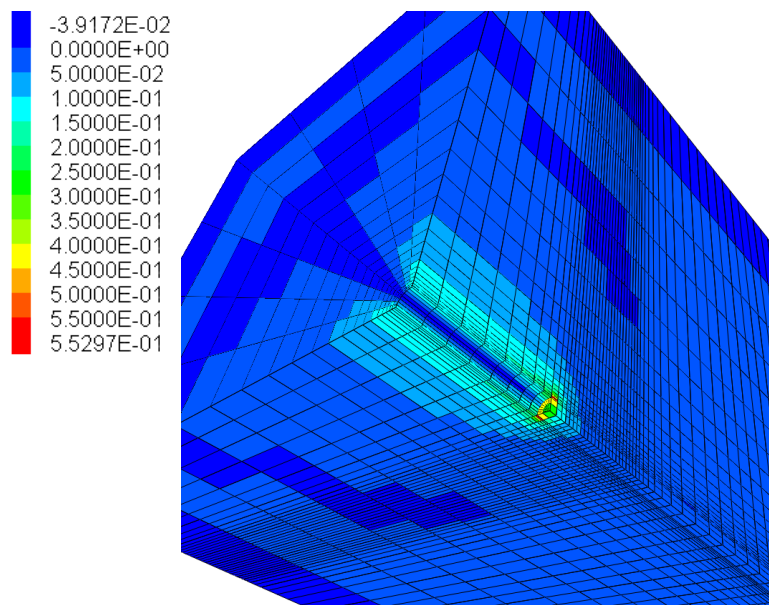


Bild 6.110: Vergleichszeitpunkt 2: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator für den Vortrieb nach dem Ausbruch der achten Elementreihe berechneten Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die Porenwasserdruckabweichung bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

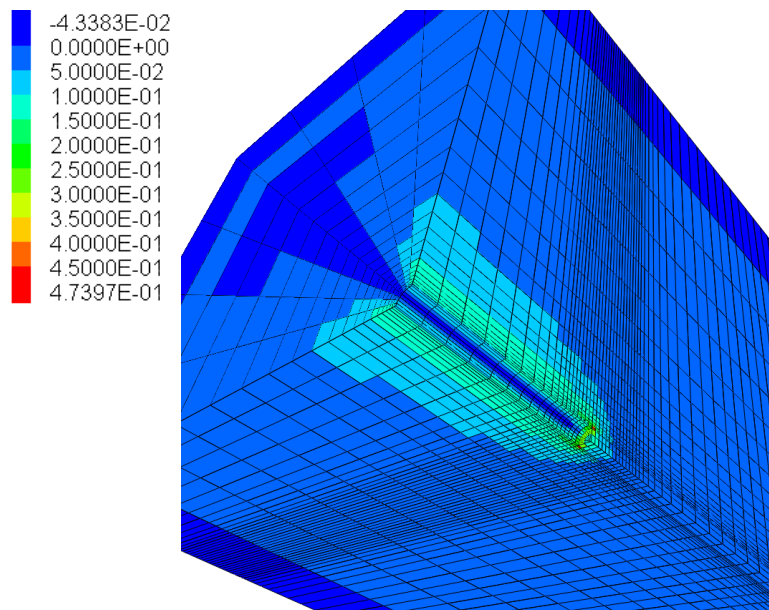


Bild 6.111: Vergleichszeitpunkt 3: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator für den Vortrieb nach dem Ausbruch der 18. Elementreihe berechneten Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die Porenwasserdruckabweichung bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

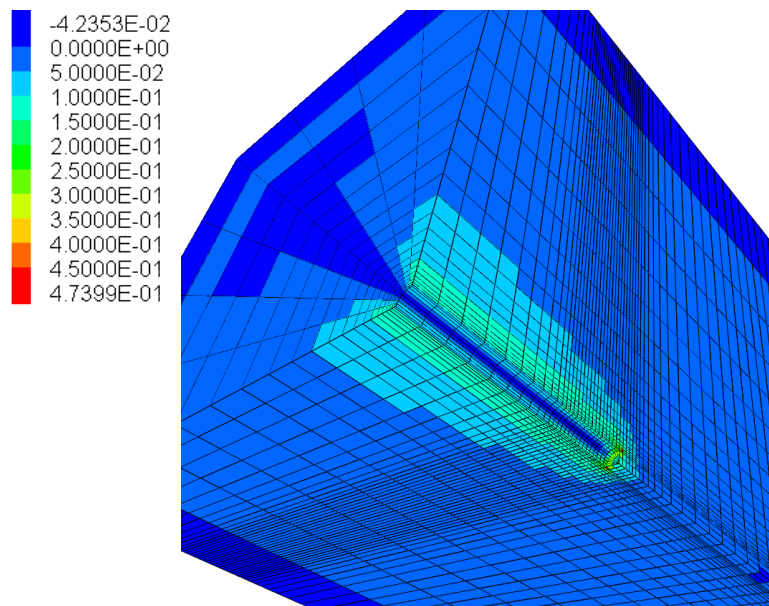


Bild 6.112: Vergleichszeitpunkt 4: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator für den Vortrieb nach dem Ausbruch der 26. Elementreihe berechneten Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die Porenwasserdruckabweichung bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

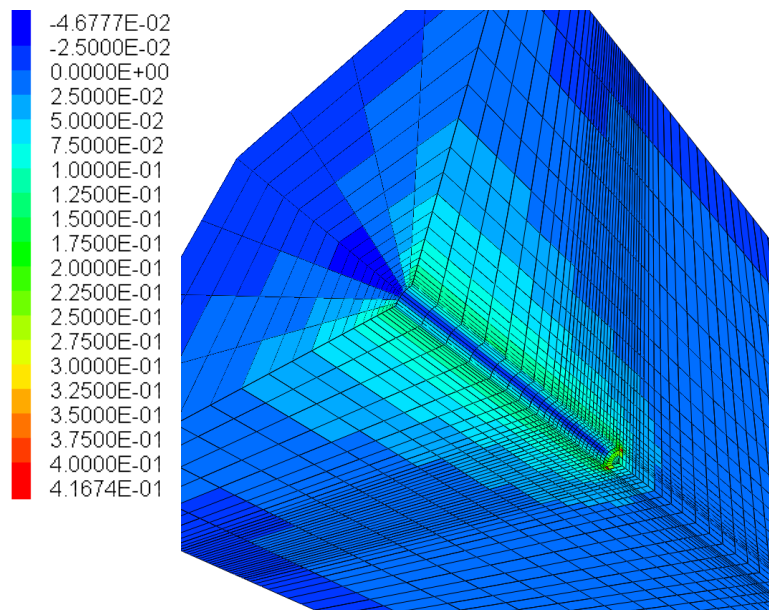


Bild 6.113: Vergleichszeitpunkt 5: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator berechneten, eine Stunde nach Abschluss des Vortriebs vorherrschenden Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die Porenwasserdruckdifferenz bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

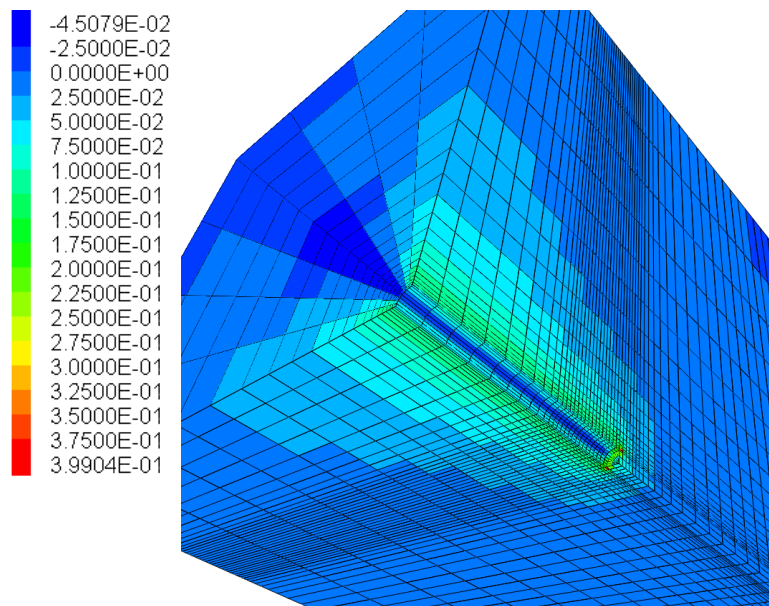


Bild 6.114: Vergleichszeitpunkt 6: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator berechneten, sieben Stunden nach Abschluss des Vortriebs vorherrschenden Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die Porenwasserdruckdifferenz bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

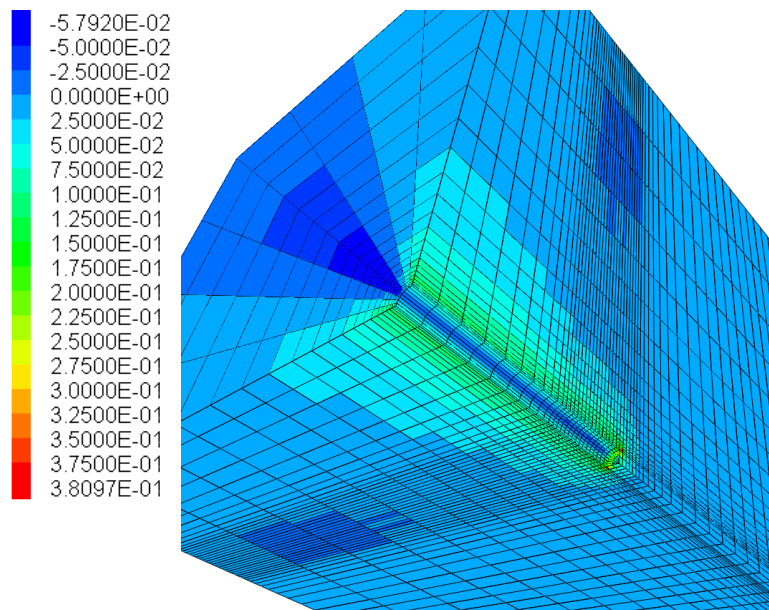


Bild 6.115: Vergleichszeitpunkt 7: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator berechneten, 23 Stunden nach Abschluss des Vortriebs vorherrschenden Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die Porenwasserdruckdifferenz bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

Der Betrachtung der Serie von Flächenplots in Bild 6.109 bis Bild 6.115 kann entnommen werden, dass von Beginn der Vortriebssimulation an bis hin zum Ende der Strömungssimulation nach insgesamt 24 Stunden in den größten Teilen des Modells eine gute Übereinstimmung zwischen den mit dem FTK-Simulator und den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Porenwasserdrücken vorherrscht. Die relativen Ergebnisabweichungen liegen in einem Zahlenwertebereich von $-5,8\% \leq \Delta_{rel} \leq 10,0\%$. Lediglich im Bereich des Bohrlochtiefsten ergeben sich bereits ab Beginn der Vortriebssimulation signifikante relative Ergebnisabweichungen zwischen den mittels $FLAC^{3D}$ und den mit dem FTK-Simulator berechneten Porenwasserdrücken. Für den in Bild 6.109 zu betrachtenden Observationszeitpunkt mit dem Stand des Bohrlochtiefsten in einer Teufe von $t_{BL} = 0,3$ m beträgt die relative Porenwasserdruckabweichung in einigen an der roten Färbung zu erkennenden Zonen im Gebirge nahe des Bohrlochtiefsten $\Delta_{rel} \approx 71,0\%$. Wie den nachfolgenden Flächenplots zu entnehmen ist, bleibt über den gesamten Berechnungszeitraum bis hin zum Erreichen des stationären Strömungszustands im Gebirgsbereich nahe des Bohrlochtiefsten eine signifikante relative Ergebnisabweichung in Bezug auf die berechneten Porenwasserdrücke bestehen. Während die relative Ergebnisabweichung in Bezug auf den Porenwasserdruck zum ersten Vergleichszeitpunkt wie bereits beschrieben $\Delta_{rel} \approx 71,0\%$ beträgt, nimmt sie für die nachfolgend dargestellten hydraulischen

Simulationszeitpunkte jeweils etwas ab, bis sie für den in Bild 6.115 dargestellten, innerhalb des stationären Strömungszustandes gelegenen siebten Vergleichszeitpunkt aber immerhin noch einen Zahlenwert von $\Delta_{\text{rel}} \approx 38,0 \%$ erreicht. Es ist allerdings hervorzuheben, dass die in allen Flächenplots der Bilderserie von Bild 6.109 bis Bild 6.115 zu betrachtenden Gebirgs-elemente mit großen relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der berechneten Porenwasserdrücke sich lokal stark eingeschränkt ausschließlich im jeweilig unmittelbar dem Bohrlochtiefsten vorgelagerten Gebirgsbereich identifizieren lassen.

In guter struktureller Übereinstimmung mit den für das quasi-zweidimensionale Bohrloch-scheibenmodell berechneten und in Bild 6.92 zu betrachtenden relativen Porenwasserdruck-abweichungen ist in dem innerhalb der Stirnfläche des dreidimensionalen Bohrlochmodells orthogonal zur Bohrlochlängsachse unter $\alpha = 45^\circ$ schräg nach oben von der Bohrlochkontur in Richtung des Modellrands verlaufenden Gebirgsbereich in Bild 6.115 zu erkennen, dass die berechneten relativen Porenwasserdruckabweichungen hier nach dem Erreichen des stationären Strömungszustandes einen negativen Zahlenwert in der Größenordnung von $\Delta_{\text{rel}} \approx -5,8 \%$ angenommen haben. Diese Abweichung bedeutet, dass die mit dem FTK-Simulator generierten Porenwasserdrücke in diesem Bereich unterhalb der mit dem Simulator $\text{FLAC}^{3\text{D}}$ berechneten Porenwasserdrücke liegen. Insgesamt lässt sich für die bezüglich der Porenwasserdruckverteilung nach dem Erreichen des stationären Strömungszustandes in der $\Delta l = 1 \text{ m}$ vom Bohrlochtiefsten entfernt liegenden vorderen Stirnfläche des Modells berechneten relativen Ergebnisabweichungen eine gute qualitative und quantitative Übereinstimmung mit den für das quasi-zweidimensionale Bohrlochmodell generierten relativen Ergebnisabweichungen feststellen.

Auch bezüglich der sich in der Stirnfläche des dreidimensionalen Bohrlochmodells orthogonal zur Bohrlochlängsachse vertikal und horizontal von der Bohrlochkontur aus in das Gebirge hinein erstreckenden Gebirgsbereiche ist mit relativen Ergebnisabweichungen im Zahlenwertebereich von $\Delta_{\text{rel}} < 10,0 \%$ in unmittelbarer Nähe der Bohrlochkontur und relativen Ergebnisabweichungen von $\Delta_{\text{rel}} < 5,0 \%$ im konturferneren Gebirgsbereich eine große Ähnlichkeit zwischen den für das dreidimensionale Bohrlochmodell und den für das quasi-zweidimensionale Bohrlochmodell berechneten relativen Porenwasserdruckabweichungen festzustellen.

Abgesehen von einigen wenigen im unmittelbaren Bereich des Bohrlochtiefsten gelegenen Gebirgszonen konnte somit für das dreidimensionale Bohrlochmodell in Bezug auf die be-

rechneten Porenwasserdrücke eine mit der für das quasi-zweidimensionale Bohrlochscheibenmodell vergleichbare Ergebnisqualität im Rahmen der durchgeführten hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulationen erreicht werden. Den als signifikant identifizierten Porenwasserdruckabweichungen im Bereich des Bohrlochtiefsten ist im Rahmen zukünftiger hydraulisch-mechanisch gekoppelter Simulationsarbeiten mit dem FTK-Simulator weiter nachzugehen.

Eine mögliche Ursache für die sich im Bereich des Bohrlochtiefsten ergebenden großen Ergebnisabweichungen könnte der in diesem Bereich mit Rücksicht auf die Gesamtanzahl der Zonen im Modell vergleichsweise grob gehaltenen Diskretisierung in Richtung der Bohrlochlängsachse begründet sein. Mit Rücksicht auf die zu erwartenden sehr hohen Berechnungszeiten insbesondere bei der Verwendung des Simulators FLAC^{3D} sollten weitere numerische Berechnungen mit feiner diskretisierten Modellen allerdings erst dann durchgeführt werden, wenn weitere vorhandene Faktoren, die zu Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem FTK-Simulator und den mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Simulationsergebnissen führen können, systematisch ausgeschlossen werden können. Derartige Faktoren werden in Abschnitt 6.4.3.5 im Rahmen der Ergebnisdiskussion für die mittels des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Berechnungsmodells eines Bohrlochs beschrieben (Stichwort: *Voronoi-Strukturen*).

(c) Vergleich der berechneten maximalen Hauptspannungen

Im vorliegenden Abschnitt werden die relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten maximalen Hauptspannungen miteinander verglichen. Für den Vergleich der mit dem Simulator FLAC^{3D} mit den mit dem FTK-Simulator berechneten maximalen Hauptspannungen sind in der Bilderserie von Bild 6.117 bis Bild 6.123 die relativen Hauptspannungsabweichungen zu den in Tabelle 6.9 aufgelisteten Simulationszeitpunkten dargestellt. Bild 6.116 zeigt zunächst die mit dem FTK-Simulator berechnete Verteilung der maximalen Hauptspannungen im stationären Zustand zum Zeitpunkt $t = 23$ Stunden nach Beendigung des Bohrlochabteufens.

Aus der Betrachtung von Bild 6.116 geht hervor, dass weite Teile des Berechnungsmodells mechanisch nicht oder nur geringfügig durch das Abteufen des Bohrlochs beeinflusst werden. Lediglich in der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochs im Abstand von in etwa bis zu ei-

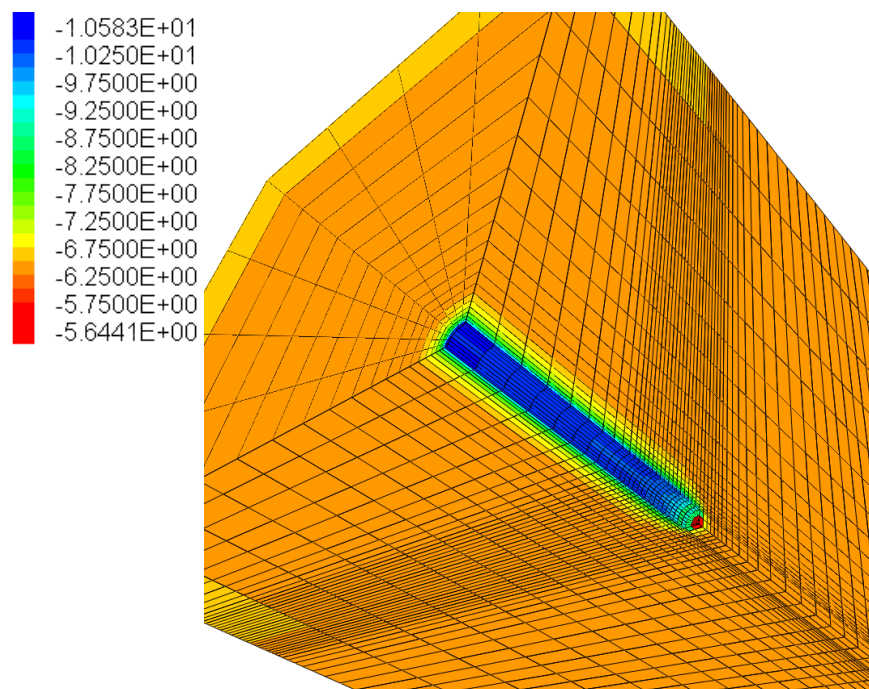


Bild 6.116: Verteilung der maximalen Hauptspannungen im stationären Zustand für das dreidimensionale Bohrlochmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die maximale Hauptspannung in MPa an.

dem Bohrlochradius zur Bohrlochkontur kann eine signifikante Erhöhung der größten Hauptspannungen, die für den hier betrachteten Fall eines kreisrunden Hohlraums in einem Gebirge mit isotropem Primärspannungszustand den tangential um das Bohrloch herum verlaufenden Sekundärspannungen entsprechen, beobachtet werden. Der zugehörigen Farbskala in Bild 6.116 kann entnommen werden, dass die Tangentialspannungen an der Bohrlochkontur maximal einen Zahlenwert von $\sigma_{\max} \approx 10,6$ MPa erreichen. Die maximalen Tangentialspannungen im Gebirge werden, wie ebenfalls der Betrachtung von Bild 6.116 entnommen werden kann, im Bereich der vorderen Berandungsfläche des Modells und somit maximal weit entfernt vom Bohrlochtiefsten erreicht. Mit zunehmender Annäherung an das Bohrlochtiefste nehmen in Bohrlochlängsrichtung, wie an der farblichen Abstufungen der Blautöne in Bild 6.116 zu erkennen ist, die mit dem FTK-Simulator um das Bohrloch herum verlaufenden berechneten maximalen Hauptspannungen geringfügig ab. Hier zeigt sich die nur im Rahmen einer dreidimensionalen Vortriebssimulation abbildbare Tragwirkung des vor dem Bohrlochtiefsten gelegenen Gebirges. Interessant zu beobachten ist in diesem Zusammenhang, dass für die unmittelbar vor dem Bohrlochtiefsten gelegenen Gebirgszonen eine geringfügig gegenüber dem isotropen Primärspannungszustand abgesenkte maximale Hauptspannung berechnet

worden ist. Die Absenkung der maximalen Hauptspannungen gegenüber den im Primärspannungszustand vorherrschenden Spannungen ist auf die ebenfalls nur in einem dreidimensionalen Modell abbildbare Traggewölbeausbildung um das Bohrlochtiefste herum zurückzuführen (entsprechend Ortsbrust bei Tunnelvortrieb).

Qualitativ erscheint die mit dem FTK-Simulator für den stationären Zustand unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrlochmodells berechnete Verteilung der maximalen Hauptspannungen auf Basis der optischen Begutachtung von Bild 6.116 aus geomechanischer Sicht sinnvoll zu sein. Die quantitative Überprüfung der mit dem FTK-Simulator berechneten maximalen Hauptspannungszustände erfolgt anhand des Vergleiches mit den mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten maximalen Hauptspannungsverteilungen in Bild 6.117 bis Bild 6.123.

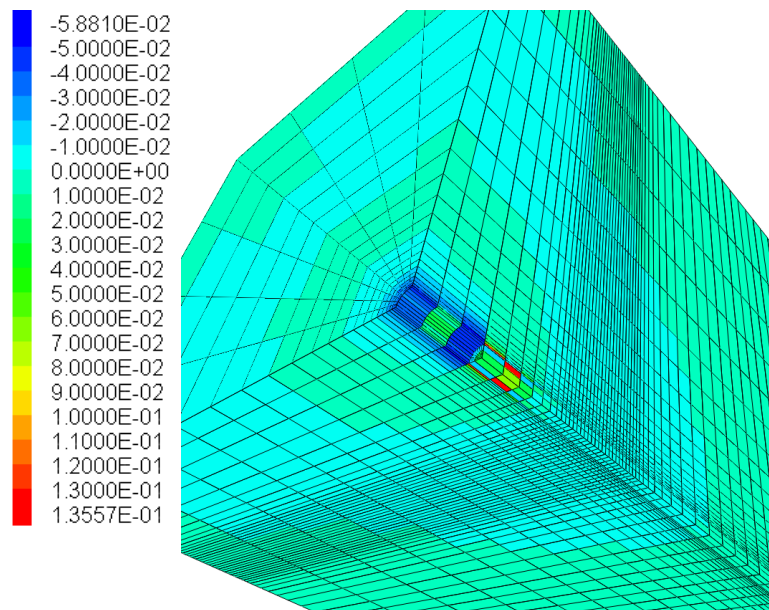


Bild 6.117: Vergleichszeitpunkt 1: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator FLAC^{3D} und den mit dem FTK-Simulator für den Vortrieb nach dem Ausbruch der dritten Elementreihe berechneten Verteilungen der maximalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Ergebnisabweichung bezüglich der maximalen Hauptspannungen bezogen auf den vom Simulator FLAC^{3D} berechneten Zahlenwert an.

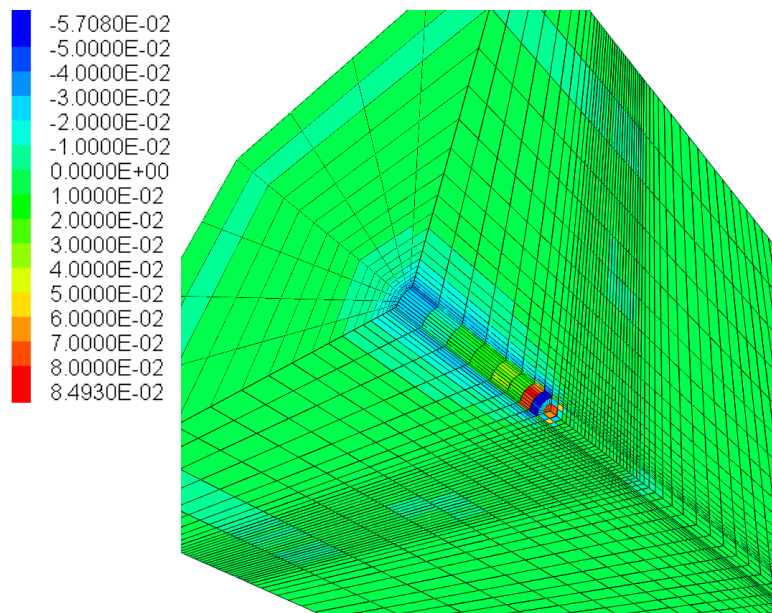


Bild 6.118: Vergleichszeitpunkt 2: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und den mit dem FTK-Simulator für den Vortrieb nach dem Ausbruch der achten Elementreihe berechneten Verteilungen der maximalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Ergebnisabweichung bezüglich der maximalen Hauptspannungen bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

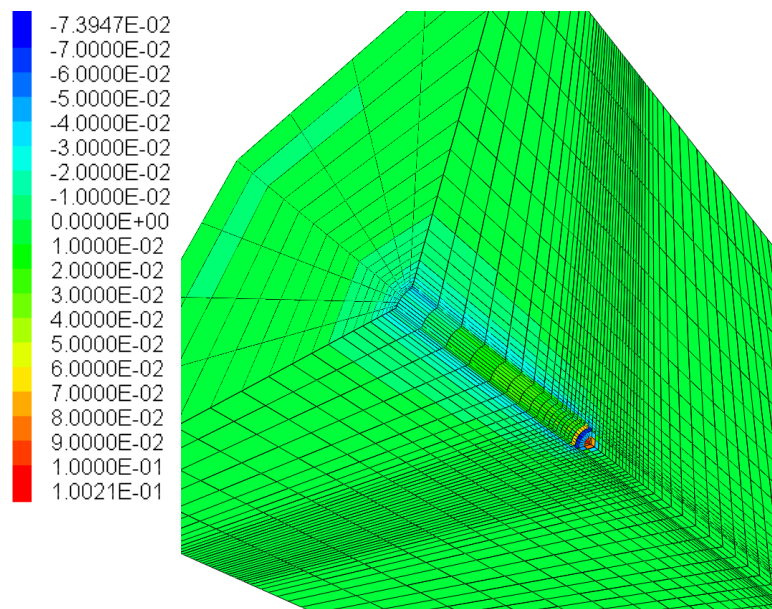


Bild 6.119: Vergleichszeitpunkt 3: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und den mit dem FTK-Simulator für den Vortrieb nach dem Ausbruch der 18. Elementreihe berechneten Verteilungen der maximalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Ergebnisabweichung bezüglich der maximalen Hauptspannungen bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

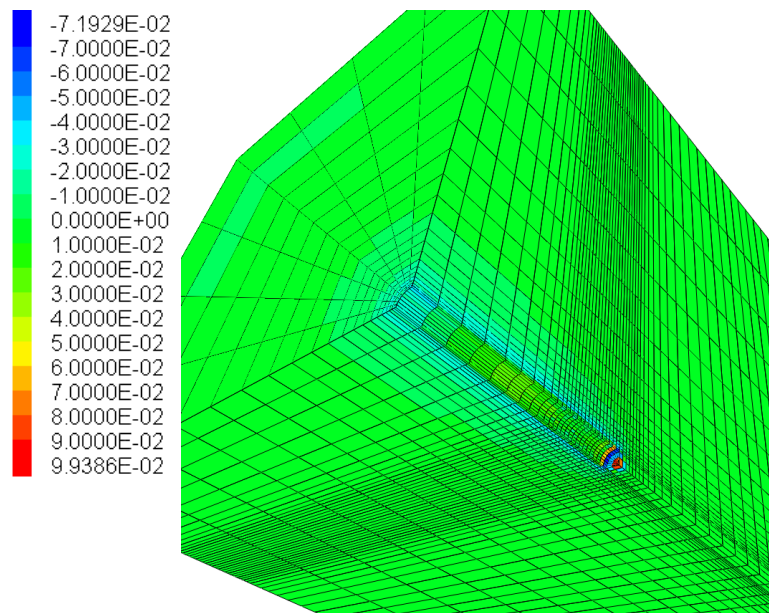


Bild 6.120: Vergleichszeitpunkt 4: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und den mit dem FTK-Simulator für den Vortrieb nach dem Ausbruch der 26 Elementreihe berechneten Verteilungen der maximalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Ergebnisabweichung bezüglich der maximalen Hauptspannungen bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

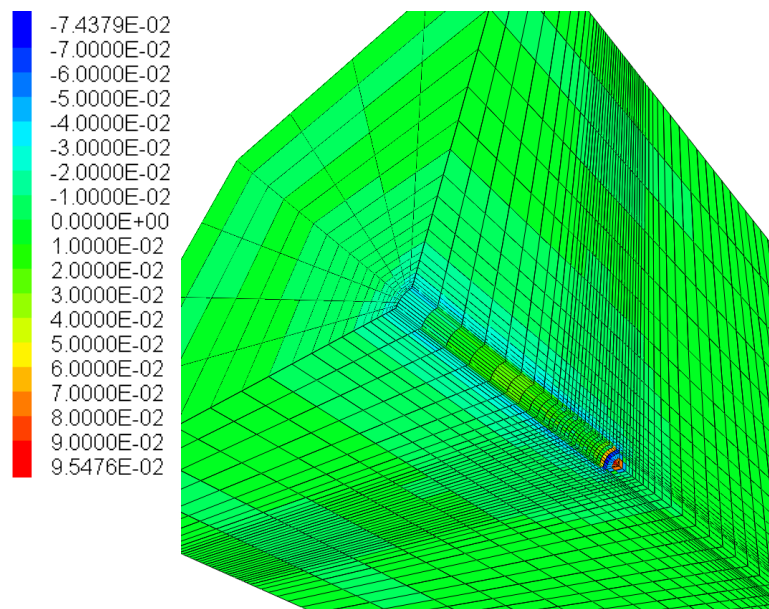


Bild 6.121: Vergleichszeitpunkt 5: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und den mit dem FTK-Simulator berechneten, eine Stunde nach Abschluss des Vortriebs vorherrschenden Verteilungen der maximalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Ergebnisabweichung bezüglich der maximalen Hauptspannungen bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

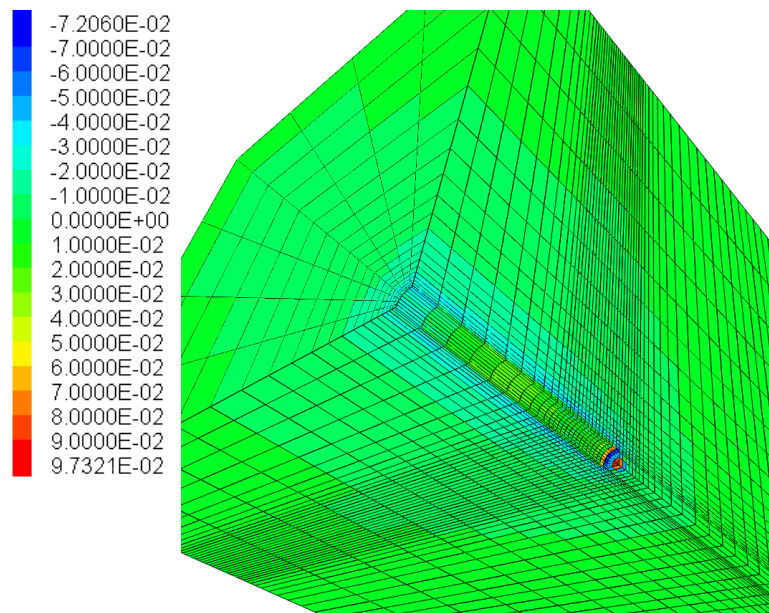


Bild 6.122: Vergleichszeitpunkt 6: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und den mit dem FTK-Simulator berechneten, 7 Stunden nach Abschluss des Vortriebs vorherrschenden Verteilungen der maximalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Ergebnisabweichung bezüglich der maximalen Hauptspannungen bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

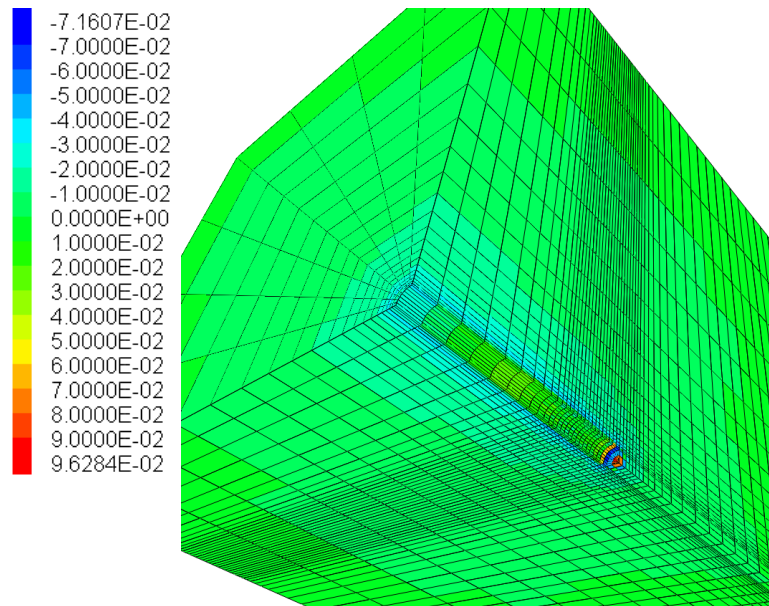


Bild 6.123: Vergleichszeitpunkt 7: Relative Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und den mit dem FTK-Simulator berechneten, 23 Stunden nach Abschluss des Vortriebs vorherrschenden Verteilungen der maximalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Ergebnisabweichung bezüglich der maximalen Hauptspannungen bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.



Der Betrachtung der Serie von Flächenplots in Bild 6.117 bis Bild 6.123 kann eine Bandbreite der berechneten relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die maximalen Hauptspannungen in einem Zahlenwertebereich von $-7,4 \% \leq \Delta_{\text{rel}} \leq 13,6 \%$ entnommen werden. Während die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten maximalen Hauptspannungen sich dabei für den ersten betrachteten Vergleichszeitpunkt in einem Zahlenwertebereich von $-5,9 \% \leq \Delta_{\text{rel}} \leq 13,6 \%$ unterscheiden, liegen die für den stationären Zustand berechneten relativen Abweichungen in einem Zahlenwertebereich von $-7,2 \% \leq \Delta_{\text{rel}} \leq 9,6 \%$.

Insgesamt lässt sich für alle betrachteten Simulationszeitpunkte feststellen, dass, wie den Darstellungen der maximalen Hauptspannungszustände zu den betrachteten Simulationszeitpunkten in Bild 6.117 bis Bild 6.123 zu entnehmen ist, in einem Abstand von je nach betrachtetem Simulationszeitpunkt $\Delta_r \approx 2-3$ Bohrlochradien zur Bohrlochkontur eine sehr präzise Übereinstimmung im Zahlenwertebereich von $\Delta_{\text{rel}} \leq 1,0 \%$ zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten maximalen Hauptspannungen vorliegt. Die größeren berechneten relativen Ergebnisabweichungen sind ausschließlich in den unmittelbar um die Bohrlochkontur herum angeordneten Gebirgszonen zu identifizieren. Weiter ist festzustellen, dass die Gebirgszonen mit besonders großen relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten maximalen Hauptspannungen, wie es auch schon in Abschnitt 6.4.3.6(b) in Bezug auf die relativen Porenwasserdruckabweichungen zu identifizieren gewesen ist, sowohl während des Vortriebs wie auch nach Abschluss des Vortriebs im Bereich des Bohrlochtiefsten lokalisiert werden können. Dabei befinden sich im Gebirgsbereich in der unmittelbaren Nähe des Bohrlochtiefsten sowohl die Gebirgszonen mit den größten positiven relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die maximalen Hauptspannungen wie auch die Gebirgszonen mit den größten negativen relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die berechneten maximalen Hauptspannungen.

Die Betrachtung der Bilderserie von Bild 6.117 bis Bild 6.123 verdeutlicht somit, dass die größten relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten maximalen Hauptspannungen sowohl in positiver wie auch in negativer Richtung in den Gebirgszonen, die im Bereich des Bohrlochtiefsten lokalisiert sind und in denen somit die aus gebirgsmechanischer Sicht komplexeste Situation vorherrscht, vorliegen. Wie bereits im Rahmen der Diskussion der relativen Porenwasserdruckabweichungen für das dreidimensionale Bohrlochmodell angeführt worden ist, erscheint es auch in Bezug auf die identifizierten Abweichungen bezüglich der mittels der beiden unterschiedlichen Simula-

toren berechneten maximalen Hauptspannungen ratsam, im Rahmen von zukünftig durchzuführenden numerischen Berechnungen den Einfluss einer Diskretisierungsverfeinerung im Ortsbrustbereich insbesondere in Bohrlochlängsrichtung auf die relativen Ergebnisabweichungen zu untersuchen. Wie im vorangehenden Abschnitt 6.4.3.6(b) bereits erwähnt worden ist, ist im Rahmen dieses Vorhabens im Hinblick auf die insbesondere bei der Verwendung des Simulators FLAC^{3D} zu erwartenden sehr großen Berechnungszeiten von einer weiteren Untersuchung des Diskretisierungseinflusses in Bezug auf die Berechnungen mit dem dreidimensionalen Bohrlochmodell abgesehen worden.

(d) Schlussfolgerungen

Abgesehen von einigen wenigen Gebirgszonen, die im Gebirge unmittelbar im Bereich des Bohrlochtiefsten lokalisiert sind, ist für die Berechnungen mit dem dreidimensionalen Bohrlochmodell sowohl für den stationären Strömungszustand wie auch für die weiteren untersuchten ausgewählten Simulationszeitpunkte eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen den mit dem FTK-Simulator und den mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Porenwasserdrücken und maximalen Hauptspannungen festzustellen. Bezüglich der wenigen in der Nähe des Bohrlochtiefsten gelegenen Zonen, für die nach Gleichung (6.21) in Abschnitt 6.4.3.5(d1) signifikante relative Ergebnisabweichungen in Bezug auf die berechneten Porenwasserdrücke und die berechneten maximalen Hauptspannungen identifiziert werden können, ist anzumerken, dass die als signifikant bezeichneten Ergebnisabweichungen etwa im Bereich von maximal $\Delta_{\text{rel}} \leq 71,0 \%$ bezüglich der berechneten Porenwasserdrücke und im Bereich von $\Delta_{\text{rel}} \leq 13,6 \%$ bezüglich der berechneten maximalen Hauptspannungen liegen. Gemäß Gleichung (6.21) erfolgt die Berechnung der relativen Ergebnisabweichungen jeweils bezogen auf die mit dem Simulator FLAC^{3D} ermittelten Berechnungsergebnisse.

Festzustellen ist, dass sich die identifizierten signifikanten Ergebnisabweichungen, wie der Betrachtung der Bilderserien von Bild 6.109 bis Bild 6.115 sowie von Bild 6.117 bis Bild 6.123 entnommen werden kann, auf einen sehr geringen Anteil der Gebirgszonen beschränken und die Abweichungen lokal maximal $\Delta_{\text{rel}} \leq 71,0 \%$ betragen. Darüber hinaus ist festzustellen, dass für alle weiteren Gebirgszonen gute bis sehr gute Übereinstimmungen zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Simulationsergebnissen vorliegen. Damit ist der Beitrag zur Validierung des FTK-Simulators anhand des Vergleichs mit den vom renommierten kommerziellen Simulator FLAC^{3D} generierten Simulationsergeb-



nissen auch für das dreidimensionale Bohrlochmodell trotz geringfügiger Einschränkungen insgesamt als erfolgreich anzusehen.

Nach den erfolgreich durchgeführten Ergebnisvergleichen zur Validierung des FTK-Simulators für die mittels des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Bohrlochmodells eines Bohrlochs sowie die mittels des dreidimensionalen Bohrlochmodells durchgeführten Berechnungen wird nachfolgend in Abschnitt 6.4.3.7 als letzter Schritt der im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten numerischen Arbeiten zur Validierung des FTK-Simulators der Vergleich zwischen den mit dem FTK-Simulator und den mit dem Simulator FLAC^{3D} für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell generierten Simulationsergebnissen durchgeführt.

6.4.3.7 Quasi-zweidimensionale Simulation des Ausbruchs eines Streckenabschnittes

(a) Grundlegende Anmerkungen

Im vorliegenden Abschnitt wird der als wichtiger Beitrag zur Validierung des am LfD&G entwickelten FTK-Simulators zu betrachtende Ergebnisvergleich zwischen dem Simulator FLAC^{3D} und dem FTK-Simulator fortgeführt. Nachdem für den im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten insgesamt dreistufigen Ergebnisvergleich in den vorangehenden Abschnitten zunächst die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren unter Verwendung des quasi-zweidimensionalen scheibenartigen Bohrlochmodells sowie die unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrlochmodells generierten Simulationsergebnisse miteinander verglichen worden sind, erfolgt im vorliegenden Abschnitt als dritte und letzte Stufe des Ergebnisvergleichs die Gegenüberstellung der mit dem Simulator FLAC^{3D} und der mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell generierten Berechnungsergebnisse. Das zur Generierung der nachfolgend in diesem Abschnitt dargestellten Simulationsergebnisse verwendete quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell ist in Abschnitt 6.4.3.1 aus Bild 6.76 zu ersehen.

Ein sehr ausführlicher Ergebnisvergleich unter Berücksichtigung aller aus geomechanischer Sicht relevanten Zustandsgrößen hat für den quasi-zweidimensionalen Fall schon in Abschnitt 6.4.3.5 stattgefunden. Daher wird für den im vorliegenden Abschnitt untersuchten Fall der numerischen Berechnungen mittels des quasi-zweidimensionalen Streckenabschnittsmodells nicht erneut ein Vergleich sämtlicher aus geomechanischer Sicht relevanter Zustandsgrößen

vorgenommen, sondern es erfolgt eine Fokussierung auf einige ausgewählte Zustandsgrößen, die von besonderem Interesse erscheinen. Der überwiegende Teil des Vergleichs der berechneten Zustandsgrößen erfolgt für einen bereits innerhalb des stationären Strömungszustands gelegenen Simulationszeitpunkt. Darüber hinaus wird die zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdruckverteilung, die mit dem FTK-Simulator generiert worden ist, zu vier ausgewählten unterschiedlichen Simulationszeitpunkten betrachtet und mit der jeweils für den selben Simulationszeitpunkt mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdruckverteilung verglichen.

(b) Zeitliche Entwicklung der Porenwasserdruckverteilung

Die in Bild 6.124 bis Bild 6.127 zu betrachtende Serie von Flächenplots zeigt die zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdruckverteilung im Gebirge in der Umgebung des zu betrachtenden Streckenquerschnitts. Dargestellt sind in Bild 6.124 bis Bild 6.127 die Porenwasserdruckverteilungen zu den Simulationszeitpunkten 1 Tag, 128 Tage, 1024 Tage und 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenquerschnitts.

Der Betrachtung der Serie von Flächenplots in Bild 6.124 bis Bild 6.127 kann entnommen werden, dass der Porenwasserdruckabbau in der Umgebung des Streckenquerschnitts zunächst schnell voranschreitet, sodass bei der vergleichenden Betrachtung von Bild 6.124 und Bild 6.125 deutlich größere Unterschiede bezüglich der Porenwasserdruckverteilung zu den Simulationszeitpunkten $t = 1$ Tag und $t = 128$ Tage zu beobachten sind als bei der vergleichenden Betrachtung der Porenwasserdruckzustände 128 Tage und 1024 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts in Bild 6.125 und Bild 6.126. Nur noch marginale Unterschiede bezüglich der Porenwasserdruckverteilungen können zwischen Bild 6.126 und Bild 6.127, in denen die Porenwasserdruckverteilungen 1024 Tage und 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts dargestellt sind, identifiziert werden. Für spätere Simulationszeitpunkte konnte im Rahmen der Ergebnisauswertung keine weitere Veränderung der Porenwasserdruckverteilung festgestellt werden. Bei der in Bild 6.127 dargestellten Porenwasserdruckverteilung handelt es sich somit um den stationären Strömungszustand.

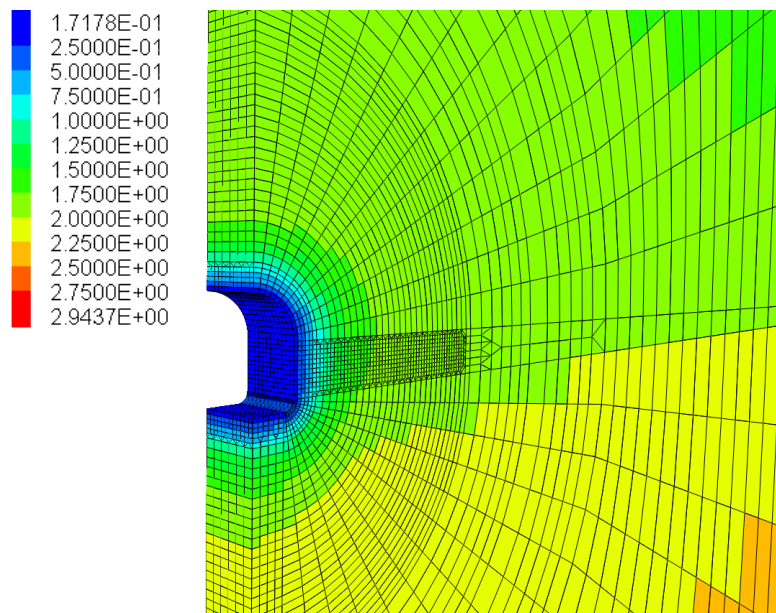


Bild 6.124: Porenwasserdruckverteilung einen Tag nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

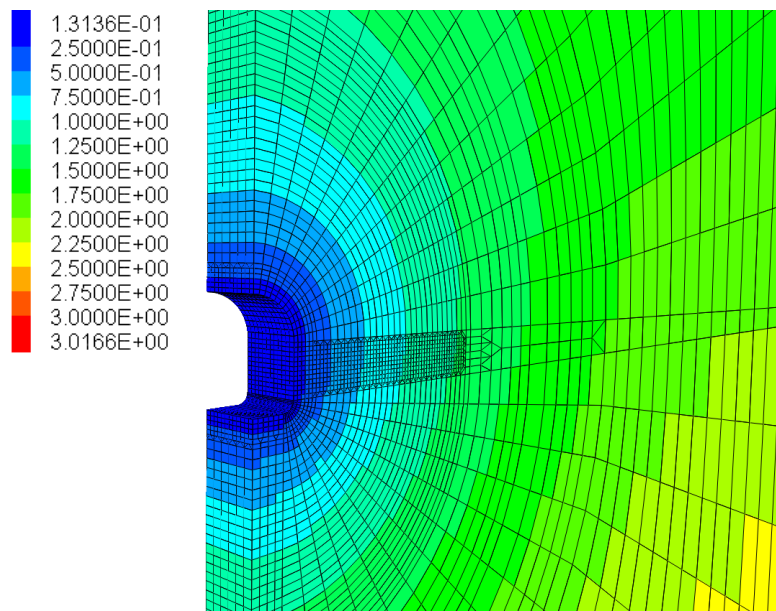


Bild 6.125: Porenwasserdruckverteilung 128 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

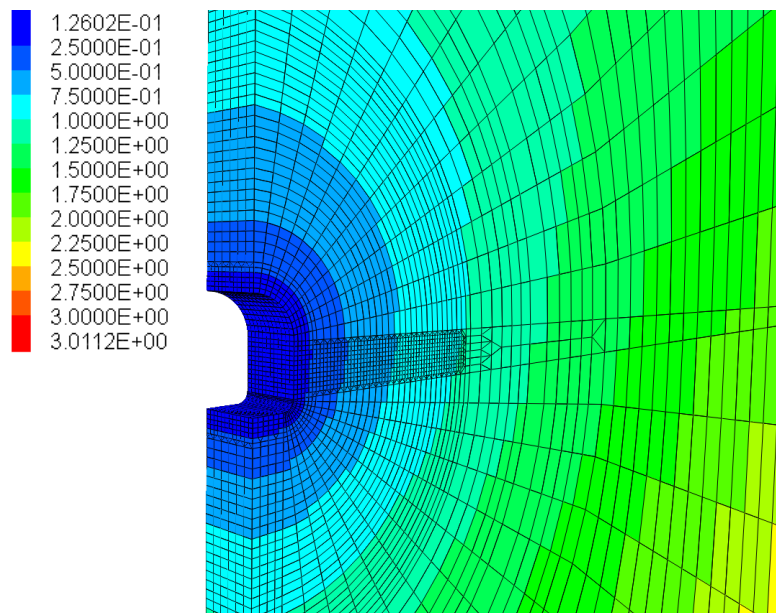


Bild 6.126: Porenwasserdruckverteilung 1024 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

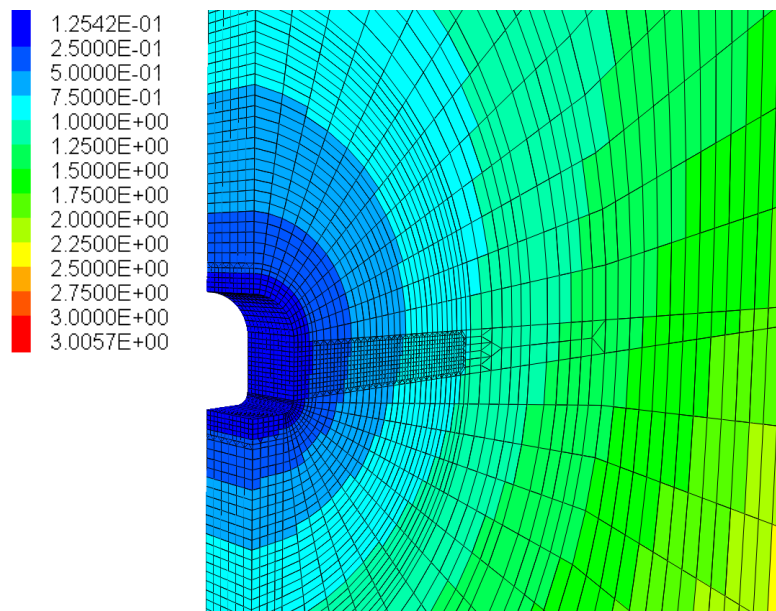


Bild 6.127: Porenwasserdruckverteilung im stationären Zustand zum Zeitpunkt 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

Auffällig ist, dass sich für die mit dem FTK-Simulator ermittelten Porenwasserdruckverteilungen in dem in Bild 6.124 bis Bild 6.127 dargestellten Gebirgsbereich ein in seiner flächenmäßigen Ausdehnung um den betrachteten Streckenabschnitt herum als annähernd radialsymmetrisch zu bezeichnender Porenwasserdruckabsenktrichter ergibt. In Abschnitt 6.4.3.5 war im Rahmen des für das quasi-zweidimensionale Bohrlochmodell durchgeführten Ergebnisvergleichs mit dem FTK-Simulator eine in ihrer flächenmäßigen Ausdehnung nicht radialsymmetrisch generierte Porenwasserdruckverteilung festgestellt worden.

Im Zuge der Analyse der Differenzen zwischen den mit dem FTK-Simulator und den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ generierten Simulationsergebnissen ist, wie in Abschnitt 6.4.3.5 erläutert wird, festgestellt worden, dass zur Erzielung von möglichst realitätsgetreuen Berechnungsergebnissen mit dem FTK-Simulator die Verwendung von *Voronoi*-Diskretisierungen notwendig ist. Diese im Rahmen der Ergebnisanalyse für das quasi-zweidimensionale Bohrloch-Scheibenmodell gewonnene Erkenntnis ist bei der Modellierung des quasi-zweidimensionalen Streckenmodells und bei der Diskretisierung des dreidimensionalen kombinierten Bohrloch-Streckenmodells in der Weise berücksichtigt worden, dass für die Modellierung des Gebirges in der näheren Umgebung des Streckenabschnittes eine möglichst *Voronoi*-artige Modelldiskretisierung vorgenommen worden ist. Die trotz der möglichst *Voronoi*-artig gewählten Diskretisierung zu den einzelnen betrachteten Simulationszeitpunkten auftretenden relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren in Bezug auf die Porenwasserdrücke generierten numerischen Berechnungsergebnissen werden im nachfolgenden Abschnitt vorgestellt und diskutiert.

(c) *Zeitliche Entwicklung der relativen Porenwasserdruckabweichungen zwischen den mit dem FTK-Simulator und den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Porenwasserdruckverteilungen*

Zur Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Porenwasserdrücke sind die relativen Ergebnisabweichungen, die nachfolgend für die vier betrachteten Simulationszeitpunkte in Bild 6.128 bis Bild 6.131 zu betrachten sind, gemäß Gleichung (6.21) in Abschnitt 6.4.3.5(d1) berechnet worden.

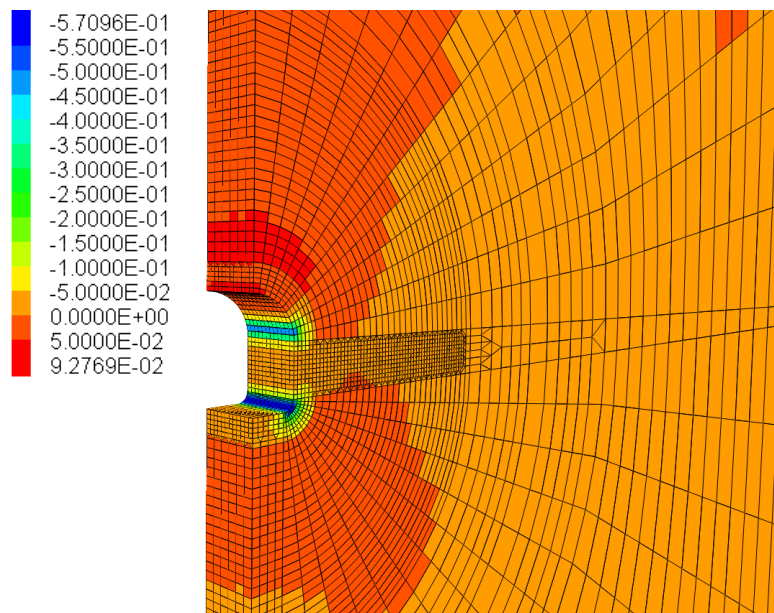


Bild 6.128: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und dem FTK-Simulator berechneten, einen Tag nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich des Porenwasserdruckes bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

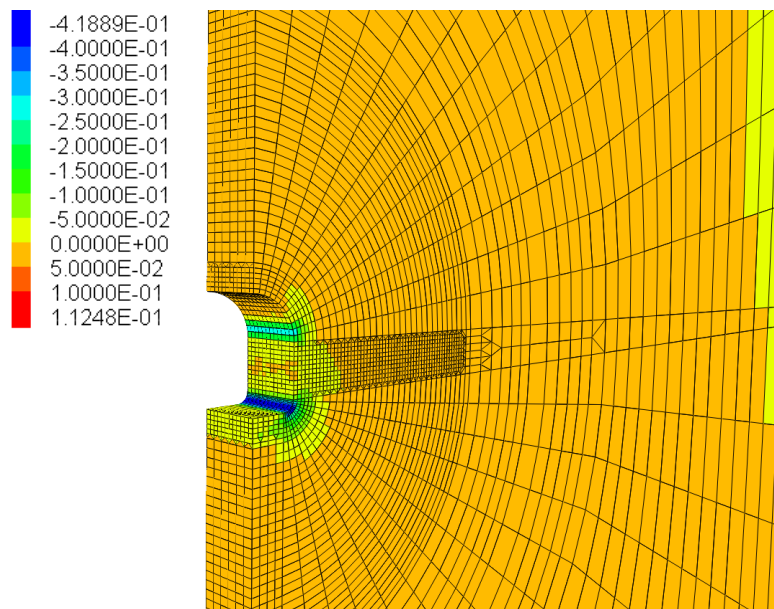


Bild 6.129: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und dem FTK-Simulator berechneten, 128 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich des Porenwasserdruckes bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

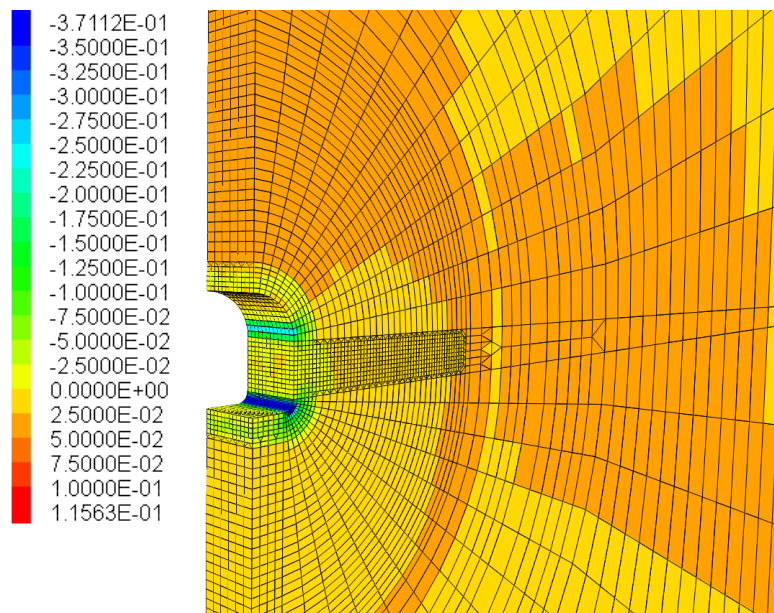


Bild 6.130: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und dem FTK-Simulator berechneten, 1024 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich des Porenwasserdruckes bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

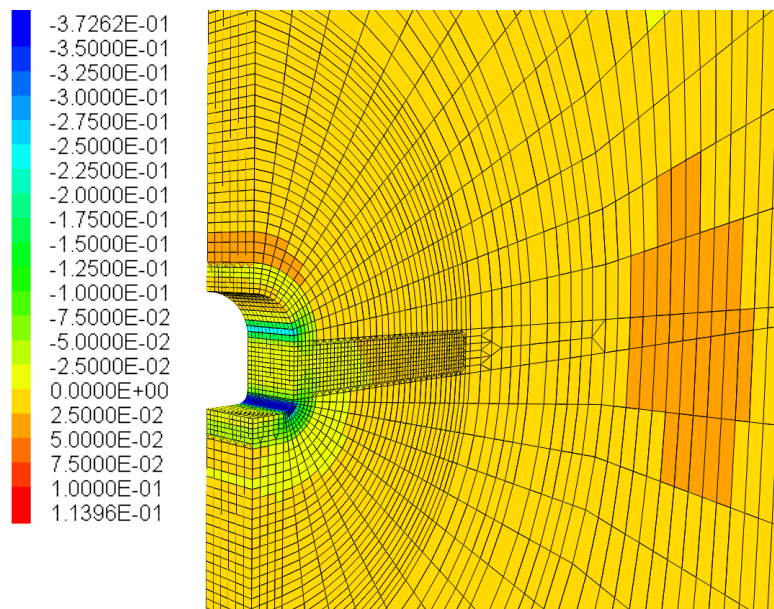


Bild 6.131: Relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und dem FTK-Simulator berechneten, im stationären Zustand 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich des Porenwasserdruckes bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

Aus der Betrachtung der in Bild 6.128 bis Bild 6.131 enthaltenen Serie von Flächenplots kann zunächst geschlussfolgert werden, dass die relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die ermittelten Porenwasserdrücke mit fortschreitender simulierter Zeit abnehmen. Für alle vier dargestellten Simulationszeitpunkte kann die maximale relative Porenwasserdruckabweichung im mechanisch sehr stark durch tangentielle Sekundärspannungen belasteten, kreisrund geformten Übergangsbereich zwischen Sohle und Stoß des Streckenabschnitts identifiziert werden. Während im Übergangsbereich zwischen Sohle und Stoß die relative Porenwasserdruckabweichung zum Simulationszeitpunkt $t = 1$ Tag nach dem Ausbruch des Streckenquerschnitts $\Delta_{\text{rel}} \approx 57 \%$ beträgt, sinkt die relative Ergebnisabweichung zum Simulationszeitpunkt $t = 128$ Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts auf einen Zahlenwert von $\Delta_{\text{rel}} \approx 42 \%$ ab. Für den Simulationszeitpunkt $t = 1024$ Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts beträgt im betrachteten Übergangsbereich zwischen Sohle und Stoß die relative Porenwasserdruckabweichung nur noch $\Delta_{\text{rel}} \approx 37 \%$. Die relativen Ergebnisabweichungen von $\Delta_{\text{rel}} \approx 37 \%$ in Bezug auf die berechneten Porenwasserdrücke ändern sich bis zum Erreichen des stationären Strömungszustands nicht mehr und können somit auch dem zum Simulationszeitpunkt $t = 4096$ Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts gehörenden Flächenplot in Bild 6.131 entnommen werden.

Den Flächenplots mit der Darstellung der relativen Porenwasserdruckabweichungen in Bild 6.128 bis Bild 6.131 kann weiter entnommen werden, dass es sich bei den Bereichen mit den vorangehend identifizierten, als signifikant zu bezeichnenden relativen Ergebnisabweichungen, die abhängig vom Simulationszeitpunkt im Zahlenwertebereich zwischen $37 \% \leq \Delta_{\text{rel}} \leq 57 \%$ liegen, um lokale, in ihrer flächenmäßigen Ausdehnung sehr begrenzte Gebirgsbereiche handelt.

Einen weiteren Gebirgsbereich in der Umgebung des Streckenabschnitts, für den ebenfalls signifikante relative Porenwasserdruckabweichungen identifiziert werden konnten, stellt der mechanisch ebenfalls durch höhere Tangentialspannungen geprägte Übergangsbereich zwischen dem gerade verlaufenden Stoßbereich und dem komplett kreisrund modellierten Firstbereich des Streckenabschnitts dar. Für den Übergangsbereich zwischen Stoß und First betragen die relativen Porenwasserdruckabweichungen zum Simulationszeitpunkt $t = 1$ Tag nach dem Streckenausbruch $\Delta_{\text{rel}} \approx 40 \%$. Zum Simulationszeitpunkt $t = 128$ Tage nach dem Ausbruch des Streckenquerschnitts liegen die anhand der Betrachtung von Bild 6.129 identifizierbaren relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die Porenwasserdrücke im Zahlenwerte-



bereich von $\Delta_{\text{rel}} \approx 30\%$. Zum Zeitpunkt $t = 1024$ Tage nach dem Streckenausbruch reduzieren sich die relativen Porenwasserdruckabweichungen im betrachteten Gebirgsbereich auf einen Zahlenwert von in etwa $\Delta_{\text{rel}} \approx 25\%$, den sie, wie Bild 6.131 entnommen werden kann, auch bis zum Erreichen des stationären Strömungszustands beibehalten.

Es lässt sich somit zusammenfassend festhalten, dass die mit Abstand größten relativen Porenwasserdruckabweichungen lokal eingeschränkt in dem Übergangsbereich zwischen Sohle und Stoß sowie in dem Übergangsbereich zwischen Stoß und First vorliegen. Den negativen Vorzeichen in den zu den Flächenplots in Bild 6.128 bis Bild 6.131 gehörigen Zahlenwerteskalen kann entnommen werden, dass in den beiden Übergangsbereichen von der Sohle zum Stoß und vom Stoß zum Firstbereich des Streckenabschnitts die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdrücke deutlich größer sind als die mit dem FTK-Simulator generierten Porenwasserdrücke.

Im Gegensatz zu den beiden vorangehend beschriebenen Übergangsbereichen zwischen Streckensohle und Stoß sowie zwischen Stoß und Firstbereich sind in großen Teilen des Modells die mit dem FTK-Simulator generierten Porenwasserdrücke eher etwas größer als die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdrücke, wie der Betrachtung der Flächenplots und der zugehörigen Zahlenwerteskalen in Bild 6.128 bis Bild 6.131 entnommen werden kann. In weiten Teilen des Modells liegen die Abweichungen zwischen den mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdrücken und den geringfügig darüber liegenden mit dem FTK-Simulator berechneten Porenwasserdrücken im Zahlenwertebereich von $0\% \leq \Delta_{\text{rel}} \leq 5\%$. Lediglich für den Simulationszeitpunkt $t = 1$ Tag nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts kann bei der Betrachtung von Bild 6.128 firstnah ein Gebirgsbereich identifiziert werden, in dem die mit dem FTK-Simulator berechneten Porenwasserdrücke um $\Delta_{\text{rel}} \approx 9\%$ größer sind als die mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Porenwasserdrücke. Zum Zeitpunkt $t = 128$ Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts und auch zu den weiteren betrachteten Simulationszeitpunkten mit den dazugehörigen Flächenplots in Bild 6.130 und Bild 6.131 ist keine große relative Ergebnisabweichung in Bezug auf die Porenwasserdrücke im firstnahen Gebirge mehr festzutellen.

Die Betrachtung der zu den Flächenplots gehörenden Zahlenwerteskalen in Bild 6.129 bis Bild 6.131 lässt erkennen, dass offensichtlich auch zu den Simulationszeitpunkten $t = 128$ Tage, $t = 1024$ Tage und $t = 4096$ Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts in mindestens einem Modellbereich eine signifikante Überschreitung der mit dem Simulator



FLAC^{3D} generierten Porenwasserdruckwerte durch die mit dem FTK-Simulator generierten Porenwasserdruckwerte stattfindet. Es ist allerdings anhand der fehlenden farblichen Zuordnung zu einer der in den Flächenplots zu betrachtenden Gebirgszonen zu erkennen, dass der entsprechende Gebirgsbereich mit einer relativen Porenwasserdruckabweichung von $\Delta_{\text{rel}} \approx 11\%$ außerhalb des in Bild 6.128 bis Bild 6.131 dargestellten modellierten Gebirgsbereiches liegen muss. Eine Identifizierung des Gebirgsbereiches, in dem die relative Porenwasserdruckabweichung von $\Delta_{\text{rel}} \approx 11\%$ berechnet worden ist, erfolgt anschließend in Abschnitt 6.4.3.7(d). Es sei an dieser Stelle bereits vorweggenommen, dass es sich bei den Zonen mit vergleichsweise großen relativen Porenwasserdruckabweichungen vorwiegend um unregelmäßig am äußeren Modellrand angeordnete Gebirgszonen handelt, sodass der Verdacht nahe liegt, dass die festzustellenden Abweichungen durch numerische Effekte hervorgerufen sein könnten. Hier besteht für zukünftig durchzuführende Berechnungen weiterer Untersuchungsbedarf und gegebenenfalls auch weiterer Optimierungsbedarf bezüglich der Programmierung des FTK-Simulators.

Abgesehen von einigen wenigen Gebirgselementen im äußeren Randbereich des Modells und abgesehen von den lokal stark eingeschränkten Übergangsbereichen zwischen Sohle und Stoß sowie zwischen Stoß und Firstbereich lässt sich für die vier unterschiedlichen betrachteten Observationszeitpunkte eine sehr präzise Übereinstimmung zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Porenwasserdrücke für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell feststellen. Im nachfolgenden Abschnitt wird die Gegenüberstellung der mit dem Simulator FLAC^{3D} und der mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell generierten Simulationsergebnisse anhand des Vergleichs weiterer ausgewählter relevanter Zustandsgrößen sowie anhand einer detaillierteren Betrachtung der Zustandsgrößen im Gebirge entlang der Streckenkontur vertieft.

(d) *Detaillierte Darstellung der Differenzen zwischen ausgewählten mit dem FTK-Simulator und mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten gebirgsmechanisch relevanten Zustandsgrößen*

(d1) *Grundlegende Anmerkungen*

Im vorliegenden Abschnitt erfolgt die Vertiefung des im vorangegangenen Abschnitt begonnenen Ergebnisvergleichs für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell anhand einer detaillierteren vergleichenden Betrachtung der mittels der beiden unterschiedlichen Si-

mulatoren generierten Porenwasserdruckverteilungen sowie darüber hinaus anhand der vergleichenden Betrachtung der unter Verwendung der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten minimalen und maximalen sekundären Hauptspannungen sowie anhand der vergleichenden Betrachtung der berechneten Matrixausnutzungsgrade. Der Vergleich der zu betrachtenden Zustandsgrößen erfolgt im vorliegenden Abschnitt ausschließlich für den innerhalb des stationären Strömungszustands gelegenen Simulationszeitpunkt $t = 4096$ Tage nach Ausbruch des Streckenabschnitts. Zur Durchführung des Ergebnisvergleichs werden für jede der betrachteten Zustandsgrößen die ermittelten relativen Ergebnisabweichungen zweifach im Flächenplot dargestellt. Zum einen erfolgt eine Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen in einem detaillierten Ausschnitt des Modells, der die Streckenkontur und das unmittelbar umgebenden Gebirge umfasst, und zum anderen werden die relativen Ergebnisabweichungen in der Totalen für das gesamte Modell dargestellt. Zusätzlich zu der Darstellung der berechneten relativen Ergebnisabweichungen erfolgt eine Gegenüberstellung der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Zustandsgrößen in einem Schnitt entlang der Kontur des modellierten Streckenabschnitts.

(d2) Differenzen bezüglich der Porenwasserdruckverteilung

In Bild 6.132 können die relativen Porenwasserdruckabweichungen im stationären Strömungszustand in einer gegenüber der im vorangehenden Abschnitt 6.4.3.7(d1) in Bild 6.131 gewählten Darstellung detaillierteren Flächenplotdarstellung betrachtet werden, bevor in Bild 6.133 eine Gegenüberstellung der unterschiedlichen mit dem FTK-Simulator und mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Porenwasserdrücke in der Konturschnittdarstellung für die entlang der Streckenkontur gelegenen Zonen erfolgt. Nachfolgend zeigt Bild 6.134 die relativen Porenwasserdruckabweichungen in der Totalen für eine Draufsicht auf die Stirnfläche des gesamten Berechnungsmodells.

Eine Diskussion der in Bild 6.132 und Bild 6.133 zu betrachtenden relativen Porenwasserdruckabweichungen ist weitestgehend bereits im vorangehenden Abschnitt 6.4.3.7(d1) erfolgt. Die Betrachtung von Bild 6.132, in dem ein Flächenplot mit einer gegenüber dem Flächenplot in Bild 6.131 vergrößerten Abbildung der Streckenkontur und des Gebirges in der Umgebung der Streckenkontur dargestellt ist, verdeutlicht noch einmal die bereits zuvor getroffene Aussage, dass die Bereiche mit den größten berechneten relativen Porenwasserdruckabweichun-

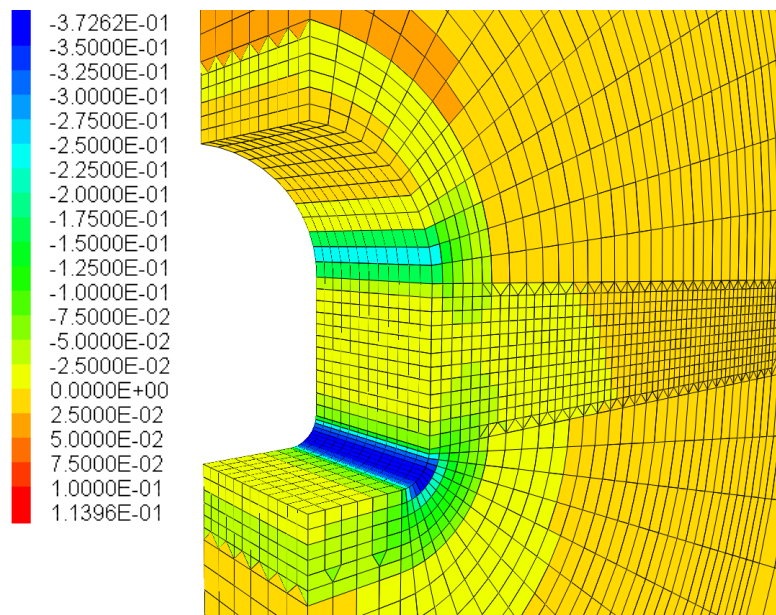


Bild 6.132: Detailansicht der Streckenkontur mit der Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und dem FTK-Simulator berechneten, im stationären Zustand zum Zeitpunkt 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Porenwasserdruckabweichung bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

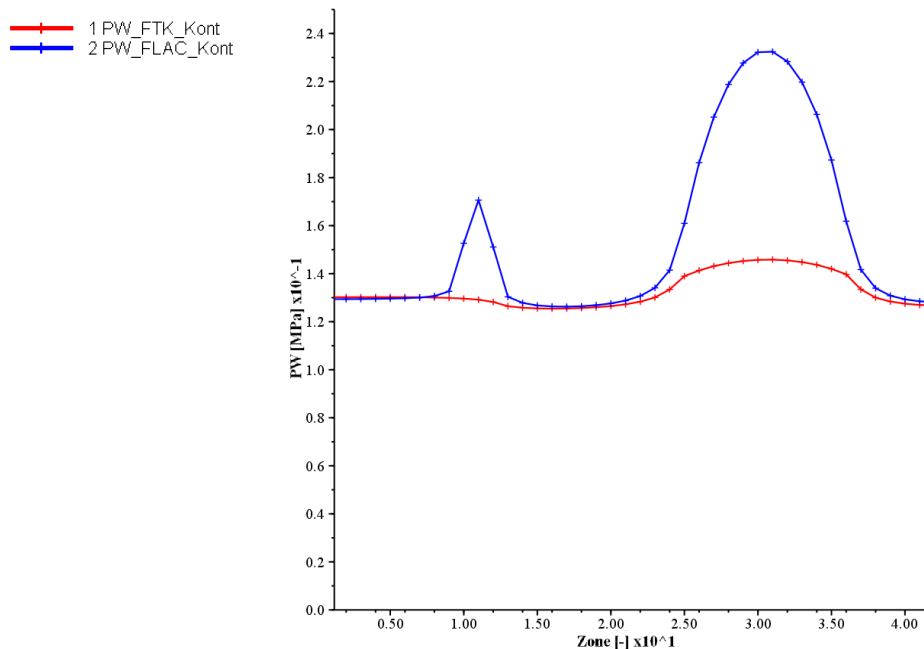


Bild 6.133: Gegenüberstellung der Porenwasserdruckverteilungen im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell im Konturschnitt (beginnend im First an der Kontur entlang über den Stoßbereich zur Sohle verlaufend) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blauer Graph) und dem FTK-Simulator (roter Graph)

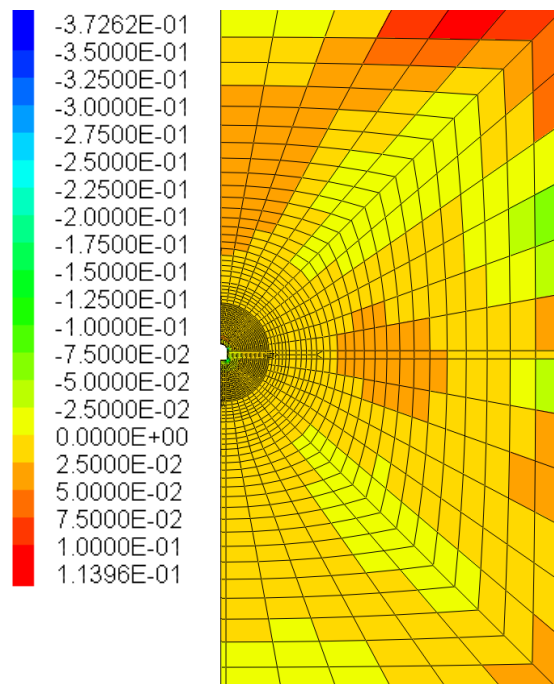


Bild 6.134: Totalansicht des Modells mit Darstellung der relativen Ergebnisabweichung zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator berechneten, im stationären Zustand zum Zeitpunkt 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Porenwasserdruckverteilungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relative Porenwasserdruckabweichung bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

gen sich unmittelbar an der Streckenkantur im Übergangsbereich zwischen dem kreisrunden Firstbereich und dem in der Draufsicht linear verlaufenden Stoßbereich sowie im ebenfalls kreisrunden Übergangsbereich zwischen dem Stoßbereich und der Sohle befinden.

Aufschluss über den Ursprung der größten identifizierbaren relativen Porenwasserdruckabweichungen in den beiden zuvor spezifizierten Gebirgsbereichen gibt die Betrachtung der Gegenüberstellung der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Porenwasserdrücke im Konturschnitt in Bild 6.133. Zur korrekten Interpretation der in Bild 6.133 dargestellten Zustandsgrößengraphen ist zunächst zu erläutern, dass die mittels der beiden Simulatoren berechneten Porenwasserdrücke in Bild 6.133 nicht wie gemeinhin üblich über eine entlang der Bohrlochkontur angelegte Laufkoordinate dargestellt werden, sondern dass es sich bei der auf der x-Achse des Diagramms dargestellten Größe um die Zonennummern der entlang der Bohrlochkontur angeordneten Gebirgszonen handelt. Die Nummerierung der Zonen beginnt für die gewählte Darstellungsart mit der Zahl 1 direkt in der oberhalb des Streckenfirstes gelegenen Zone und steigt entlang der Streckenkantur in Richtung der Sohle der Strecke an. Die Darstellungsart für die Simulationsergebnisse im Konturschnitt, bei der die

betrachtete Zustandsgröße über die entlang der Streckenkontur durchnummerierten Zonen des Modells dargestellt wird, ist zur Darstellung der Zustandsgrößen im Konturschnitt ausgewählt worden, um eine möglichst gute Korrelierbarkeit zwischen den Schnittdarstellungen und den Flächenplots zu gewährleisten.

Bei der Betrachtung von Bild 6.133 wird deutlich, dass im Konturbereich von der 9. Zone bis zur 13. Zone und im Konturbereich von der 23. Zone bis zur 38. Zone die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdrücke deutlich über den mit dem FTK-Simulator berechneten Porenwasserdrücken liegen. Während die mit dem FTK-Simulator berechneten Porenwasserdrücke entlang der gesamten Streckenkontur Zahlenwerte im Bereich von $0,13 \text{ MPa} \leq \text{PW} \leq 0,15 \text{ MPa}$ aufweisen und der Zahlenwertegraph für die mit dem FTK-Simulator berechneten Porenwasserdrücke einen als ruhig zu bezeichnende Verlauf aufweist, schwanken die mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Porenwasserdrücke zwischen Zahlenwerten im Bereich von $0,13 \text{ MPa} \leq \text{PW} \leq 0,24 \text{ MPa}$. Das absolute Maximum von $\text{PW} \approx 0,24 \text{ MPa}$ wird für die mit dem Simulator FLAC^{3D} ermittelten Porenwasserdrücke im Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle erreicht. Ein lokales Maximum, bei dem die Porenwasserdrücke für die mit dem Simulator FLAC^{3D} durchgeführte Berechnung einen Zahlenwert von $\text{PW} \approx 0,17 \text{ MPa}$ erreichen, bildet sich im Übergangsbereich zwischen Firstbereich und Streckenstoß aus. Während in einem großen Teil der entlang der Streckenkontur angeordneten Gebirgszonen die von den beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Porenwasserdrücke sehr gut miteinander übereinstimmende Zahlenwerte aufweisen, nimmt der in Bild 6.133 in blau dargestellte Zahlenwertegraph der mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Porenwasserdrücke in den beiden Konturbereichen von der 9. Zone bis zu 13. Zone sowie von der 23. Zone bis zur 38. Zone die beschriebenen Maximalwerte an.

Aus der geomechanisch-geohydraulischen Perspektive heraus betrachtet sollten theoretisch für den stationären Strömungszustand unmittelbar an der Streckenkontur unabhängig von der Positionierung der Gebirgszonen entlang der Streckenkontur in allen Gebirgszonen Porenwasserdrücke nahe des atmosphärischen Luftdrucks vorherrschen. Die mit dem FTK-Simulator für die Streckenkontur im stationären Zustand berechneten Porenwasserdrücke mit Zahlenwerten im Bereich von $0,13 \text{ MPa} \leq \text{PW} \leq 0,15 \text{ MPa}$ erscheinen somit realitätsnäher als die mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Porenwasserdrücke zu sein, die wie vorangehend beschrieben lokale Maximalwerte von $\text{PW} \approx 0,17 \text{ MPa}$ und $\text{PW} \approx 0,24 \text{ MPa}$ in den Übergangsbereichen der Streckenkontur annehmen.

Der Grund für die sehr signifikanten relativen Abweichungen zwischen den mit dem FTK-Simulator und den mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdrücken ist in Zukunft im Rahmen weiterer Forschungs- und Entwicklungsarbeiten nachzuprüfen. Insbesondere sollte im Rahmen zukünftiger Forschungsarbeiten ergründet werden, weshalb bei der Berechnung mit dem Simulator FLAC^{3D} entlang der Streckenkantur lokale, aus geomechanisch-geohydraulischer Sicht betrachtet als nicht sinnvoll zu erachtende Porenwasserdruckspitzen auftreten. Die Differenzen zwischen den mit den beiden unterschiedlichen Simulatoren entlang der Streckenkantur berechneten Porenwasserdruckverteilungen können nicht auf Differenzen bezüglich der berechneten Hauptspannungen im Bereich der Streckenkantur zurückgeführt werden, da, wie im nächsten Abschnitt aufgezeigt wird, bezüglich der Hauptspannungsverteilungen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den mit den beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Ergebnissen erzielt werden konnte. Für die identifizierten Ergebnisdifferenzen bezüglich der Porenwasserdruckverteilungen könnten sowohl eine mechanisch geprägte Ursache wie Differenzen bei der Porenvolumenentwicklung oder auch eine eher hydraulisch geprägte, aus der Simulation der Strömungsprozesse resultierende Ursache verantwortlich sein. Eine vertiefende Analyse bezüglich der identifizierten Differenzen findet im Rahmen des vorliegenden Berichts nicht statt.

(d3) Differenzen bezüglich der Hauptspannungsverteilungen

Nach dem identischen Schema, nach dem im vorangehenden Abschnitt die mit dem FTK-Simulator und die mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Porenwasserdrücke verglichen worden sind, erfolgt im vorliegenden Abschnitt ein Vergleich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren für den stationären Zustand berechneten minimalen und maximalen sekundären Hauptspannungen. In Bild 6.135 bis Bild 6.137 erfolgt zunächst die Gegenüberstellung der unter Verwendung der beiden Simulatoren berechneten minimalen Hauptspannungen. Analog zum Vergleich in Bezug auf die Porenwasserdrücke erfolgt in Bild 6.135 zunächst eine Detaildarstellung der Streckenkantur zusammen mit dem umgebenden Gebirge mit der Visualisierung der relativen Minimalspannungsabweichungen im Flächenplot, bevor in Bild 6.136 die Zahlenwertegraphen der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten minimalen Hauptspannungen im Konturschnitt gegenübergestellt werden. In Bild 6.137 sind schließlich die relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die minimalen

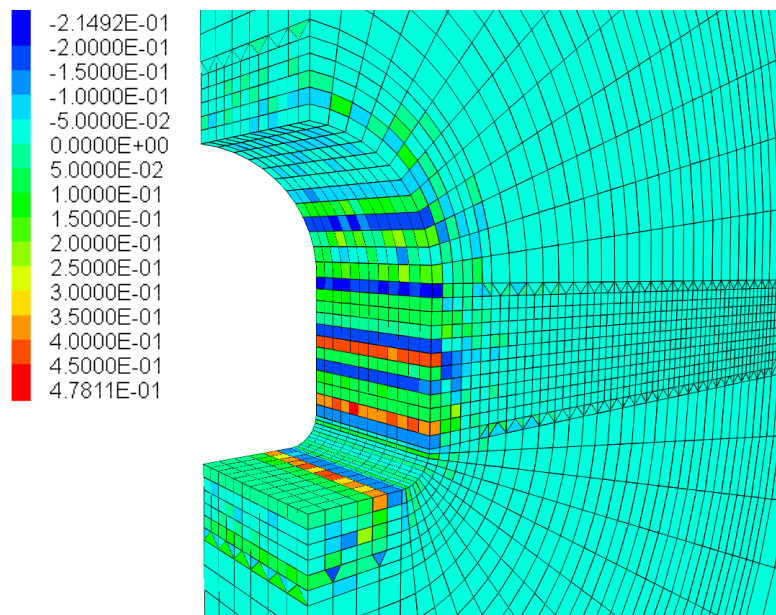


Bild 6.135: Detailansicht der Streckenkontur mit Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und der mit dem FTK-Simulator berechneten, im stationären Zustand zum Zeitpunkt 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Verteilungen der minimalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen zwischen den minimalen Hauptspannungen bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

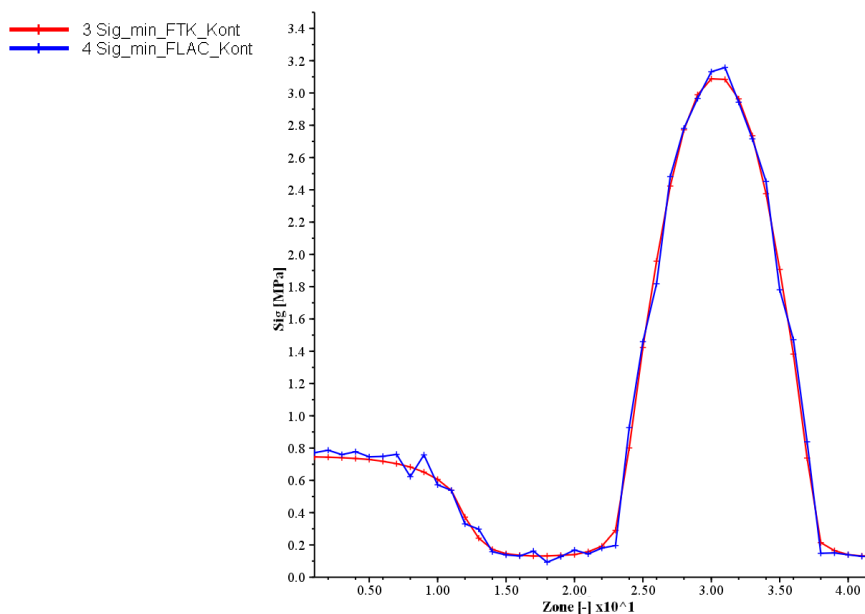


Bild 6.136: Gegenüberstellung der Verteilungen der minimalen Hauptspannungen im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell im Konturschnitt (beginnend im First an der Kontur entlang über den Stoßbereich zur Sohle verlaufend) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blauer Graph) und mit dem FTK-Simulator (roter Graph)

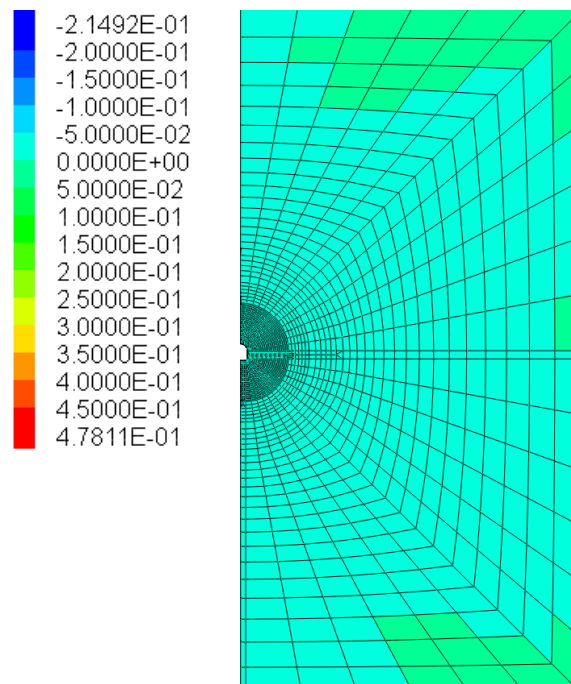


Bild 6.137: Totalansicht des Modells mit der Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator berechneten, 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Verteilungen der minimalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen zwischen den berechneten minimalen Hauptspannungen bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

Hauptspannungen in der Totalen in Form einer Draufsicht auf die Stirnfläche des quasi-zweidimensionalen Streckenabschnittsmodells zu betrachten.

Der Betrachtung der Zahlenwerteskala in Bild 6.135 kann entnommen werden, dass die relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die minimalen Hauptspannungen im Bereich von $-21\% \leq \Delta\sigma_{\min_rel} \leq 48\%$ liegen. Anhand der farblichen Zuordnung der Zahlenwerteskala zu dem in Bild 6.135 zu betrachtenden Flächenplot kann geschlussfolgert werden, dass die Extremalwerte der Ergebnisabweichungen bezüglich der minimalen Hauptspannungen unmittelbar im Bereich der Streckenkontur auftreten. Weiter kann der analysierenden Betrachtung von Bild 6.135 entnommen werden, dass entlang der Streckenkontur Gebirgszonen, in denen die mit dem FTK-Simulator generierten minimalen Hauptspannungen deutlich oberhalb der mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten minimalen Hauptspannungen liegen, unmittelbar neben solchen Gebirgszonen angeordnet sind, in denen die mit dem FTK-Simulator generierten minimalen Hauptspannungen signifikant unterhalb der mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten minimalen Hauptspannungen liegen. Die in unmittelbarer Nachbarschaft entlang



der Bohrlochkontur identifizierbaren Extremalwerte der relativen Minimalspannungsabweichungen lassen sich bei der Betrachtung von Bild 6.135 im Bereich des Streckenstoßes lokalisieren.

Die Betrachtung des Diagramms in Bild 6.136 mit dem in rot dargestellten Zahlenwertegraphen der mit dem FTK-Simulator berechneten minimalen Hauptspannungen und dem in blau dargestellten Zahlenwertegraphen der mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten minimalen Hauptspannungen zeigt, dass im Bereich der Streckenkontur insgesamt eine als gut zu bewertende Übereinstimmung zwischen den mittels der beiden Simulatoren berechneten minimalen Hauptspannungen erzielt werden konnte. Qualitativ ähneln sich die Verläufe der beiden Zahlenwertegraphen sehr. Unabhängig vom verwendeten Simulator sind entlang der Streckenkontur im Bereich des Streckenstoßes sowie im Bereich der Streckensohle die niedrigsten minimalen Hauptspannungen mit Zahlenwerten im Bereich von $\sigma_{\min} \approx 0,12$ MPa berechnet worden. Höhere Zahlenwerte in Bezug auf die minimalen Hauptspannungen sind im Bereich des kreisrund geformten Firstgewölbes ermittelt worden. Mit einem Zahlenwert von $\sigma_{\min} \approx 0,76$ MPa für die Berechnung mit dem Simulator FLAC^{3D} und einem Zahlenwert von $\sigma_{\min} \approx 0,74$ MPa für die Berechnung mit dem FTK-Simulator sind mittels beider angewendeter Simulatoren die für den Konturbereich des Firstgewölbes größten Zahlenwerte der minimalen Hauptspannungen in der Gebirgszone unmittelbar oberhalb des Firstes berechnet worden. Mit zunehmender Entfernung von der Streckenfirste entlang der Streckenkontur bis zum Streckenstoß fallen die minimalen Hauptspannungen ab, bis sie die im Streckenstoß vorherrschenden Zahlenwerte in der Größenordnung von $\sigma_{\min} \approx 0,12$ MPa erreichen. Ihren absoluten Maximalwert entlang der Streckenkontur erreichen die minimalen Hauptspannungen im ebenfalls kreisrund geformten Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle. Die maximal für den Übergangsbereich generierten minimalen Hauptspannungen betragen im Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle für die mit dem Simulator FLAC^{3D} durchgeführte Berechnung $\sigma_{\min} \approx 3,2$ MPa, während mit dem FTK-Simulator ein Zahlenwert von $\sigma_{\min} \approx 3,1$ MPa berechnet worden ist.

Trotz der qualitativ grundsätzlich guten Übereinstimmungen zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten minimalen Hauptspannungen lassen sich bei der Betrachtung von Bild 6.136 auch einige Unterschiede zwischen den beiden Zahlenwertegraphen identifizieren. Während der in rot dargestellte Zahlenwertegraph der mit dem FTK-Simulator generierten minimalen Hauptspannungen einen sehr gleichmäßigen Verlauf auf-



weist, ist der Verlauf des Zahlenwertegraphen für die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten minimalen Hauptspannungen eher als unruhig zu bezeichnen. Der etwas ungleichmäßigere Verlauf des Zahlenwertegraphen für die mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten minimalen Hauptspannungen scheint ein Indikator für numerische Unausgewogenheiten innerhalb des Modells bei der Berechnung mit dem Simulator FLAC^{3D} zu sein.

Da im vorliegenden Abschnitt die Zustandsgrößen für einen innerhalb des stationären Strömungszustands gelegenen Simulationszeitpunkt miteinander verglichen werden und für die Berechnung mit dem Simulator FLAC^{3D} zu dem betrachteten Simulationszeitpunkt die mechanische Balanciertheit des Systems einen sehr kleinen Zahlenwert in der Größenordnung von $\text{mech_force} \approx 10^{-11}$ erreicht hatte, was auf einen sehr hohen Grad an mechanischer Balanciertheit hinweist, ist eine mangelnde mechanische Balanciertheit des Systems als mögliche Erklärung für den zu beobachtenden, etwas unruhigeren Verlauf des Zahlenwertegraphen der Berechnung mit dem Simulator FLAC^{3D} auszuschließen. Die Ursache für den er etwas unruhig anmutenden Verlauf des Zahlenwertegraphen der mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten minimalen Hauptspannungen ist daher eher im Bereich der FLAC^{3D} internen hydraulisch-mechanischen Kopplungsroutine zu vermuten und gegebenenfalls in Zukunft im Rahmen weiterer Forschungsarbeiten zu erkunden.

Bedingt durch den etwas unruhigen Verlauf des blauen Zahlenwertegraphen der mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten minimalen Hauptspannungen kommt es nahezu entlang der gesamten Streckenkontur zu geringfügigen Differenzen zwischen den mit dem Simulator FLAC^{3D} und den mit dem FTK-Simulator berechneten minimalen Hauptspannungen. In Bezug auf die berechneten relativen Ergebnisabweichungen sind die Auswirkungen der dem Diagramm in Bild 6.136 zu entnehmenden und insgesamt eher als geringfügig einzustufenden Ergebnisdifferenzen in speziell den Bereichen der Streckenkontur besonders einflussreich, in denen die berechneten absoluten Zahlenwerte der minimalen Hauptspannungen besonders gering sind. Passend zur Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die berechneten minimalen Hauptspannungen in Bild 6.135 lässt sich dem Diagramm in Bild 6.136 entnehmen, dass insbesondere im Stoßbereich des simulierten Streckenabschnitts besonders niedrige minimale Hauptspannungen auftreten und dass in diesem Bereich gleichzeitig vergleichsweise große Verlaufsdifferenzen zwischen den beiden Zahlenwertegraphen vorliegen.

Der Betrachtung des Flächenplots mit der Draufsicht auf die Stirnfläche des Gesamtmodells in Bild 6.137 ist zu entnehmen, dass signifikante Abweichungen zwischen den beiden Simulatoren bezüglich der generierten minimalen Hauptspannungen ausschließlich in den Gebirgszonen in der unmittelbaren Umgebung der Streckenkontur auftreten und dass für die sonstigen Modellbereiche eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten minimalen Hauptspannungen mit relativen Ergebnisabweichungen im Bereich von $\Delta_{\text{rel}} \leq 5,0 \%$ ermittelt werden konnten.

Nach dem gleichen Schema wie in Bild 6.135 bis Bild 6.137 die Gegenüberstellung der Simulationsergebnisse in Bezug auf die ermittelten minimalen Hauptspannungen erfolgt ist, wird die Gegenüberstellung der Simulationsergebnisse in Bezug auf die maximalen Hauptspannungen in Bild 6.138 bis Bild 6.140 vorgenommen.

Der Betrachtung von Bild 6.138 kann entnommen werden, dass die relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die maximalen Hauptspannungen in einem Zahlenwertebereich von

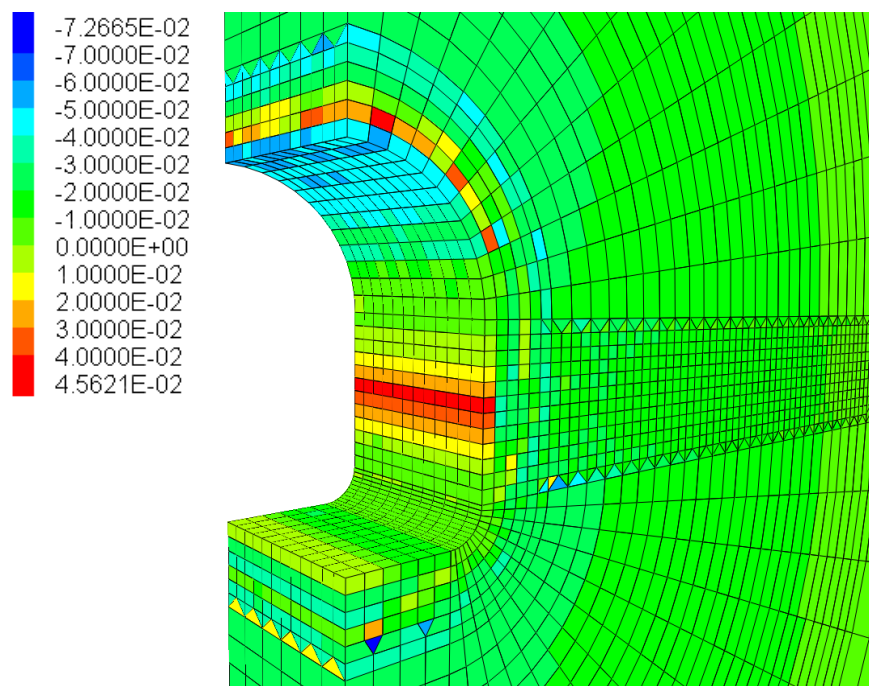


Bild 6.138: Detailansicht der Streckenkontur mit der Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator berechneten, im stationären Zustand zum Zeitpunkt 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Verteilungen der maximalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der maximalen Hauptspannungen bezogen auf den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

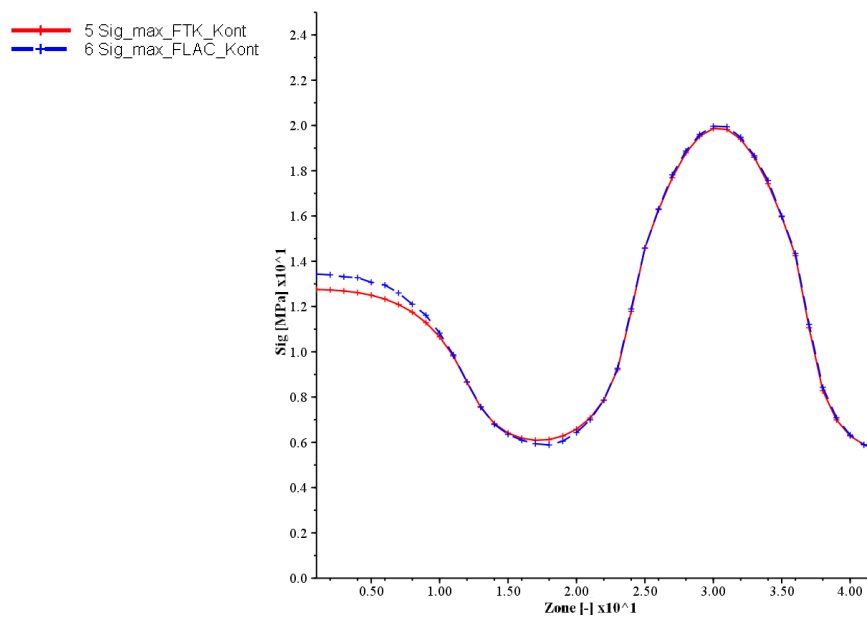


Bild 6.139: Gegenüberstellung der Verteilungen der maximalen Hauptspannungen im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell im Konturschnitt (beginnend im First an der Kontur entlang über den Stoßbereich zur Sohle verlaufend) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blauer Graph) und dem FTK-Simulator (roter Graph)

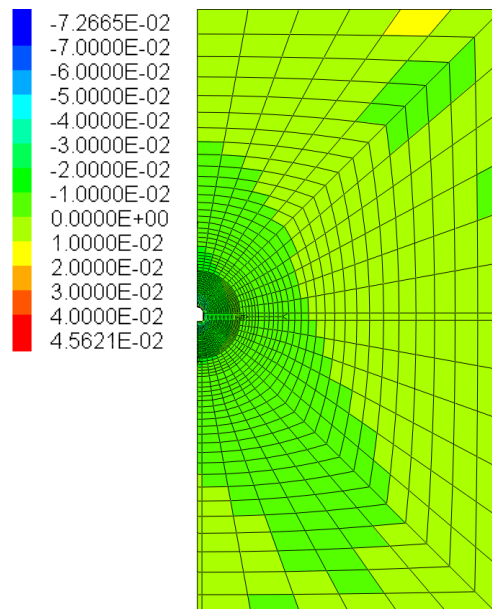


Bild 6.140: Totalansicht des Modells mit Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mittels dem Simulator $FLAC^{3D}$ und dem FTK-Simulator berechneten, im stationären Zustand zum Zeitpunkt 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Verteilungen der maximalen Hauptspannungen – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der maximalen Hauptspannungen bezogen auf den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

$-7,3 \% \leq \Delta\sigma_{\max_rel} \leq 5,6 \%$ liegen. Die Gebirgszonen, in denen die größten relativen Ergebnisabweichungen auftreten, befinden sich überwiegend unmittelbar an der Streckenkontur im Firstbereich der Strecke sowie in der näheren Umgebung der Streckenfirste. Unmittelbar an der Streckenkontur sind im Firstbereich diejenigen Gebirgselemente zu betrachten, in denen die mit dem FTK-Simulator berechneten maximalen Hauptspannungen um bis zu $\Delta\sigma_{\max_rel} \approx 7,3 \%$ unterhalb der mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten maximalen Hauptspannungen liegen. In unmittelbarer Nachbarschaft zu den Gebirgszonen, in denen relative Ergebnisabweichungen von $\Delta\sigma_{\max_rel} \approx 7,3 \%$ vorliegen, sind unregelmäßig angeordnet eine Zonenreihe tiefer in das Gebirge hinein allerdings auch Gebirgszonen festzustellen, in denen die mit dem FTK-Simulator generierten maximalen Hauptspannungen um $\Delta\sigma_{\max_rel} \approx 4,6 \%$ oberhalb der mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten maximalen Hauptspannungen liegen.

Ein weiterer entlang der Streckenkontur zu betrachtender Bereich, in dem die mit dem FTK-Simulator berechneten maximalen Hauptspannungen die mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten maximalen Hauptspannungen ebenfalls um $\Delta\sigma_{\max_rel} \approx 4,6 \%$ übertreffen, befindet sich im Stoßbereich des simulierten Streckenabschnitts. Wie der farblichen Zuordnung der Gebirgszonen zur dazugehörigen Zahlenwerteskala im Flächenplot in Bild 6.138 zu entnehmen ist, sind die Gebirgszonen mit der berechneten maximalen Hauptspannungsabweichung von bis zu $\Delta\sigma_{\max_rel} \approx 4,6 \%$ im Stoßbereich der Strecke deutlich systematischer und sehr viel gleichmäßiger angeordnet als im Firstbereich.

Weiter lässt sich dem in Bild 6.138 dargestellten Flächenplot entnehmen, dass signifikante relative Ergebnisabweichungen in Bezug auf die maximalen Hauptspannungen ausschließlich unmittelbar entlang der Streckenkontur oder im konturnahen Gebirge auftreten und dass in den tiefer im Gebirge gelegenen Gebirgszonen lediglich relative Ergebnisabweichungen im Zahlenwertebereich von $-1,0 \% \leq \Delta\sigma_{\max_rel} \leq 1,0 \%$ auftreten.

Der Gegenüberstellung der Zahlenwertegraphen der mit dem FTK-Simulator und der mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten maximalen Hauptspannungen im Konturschnitt in Bild 6.139 kann entsprechend dem bei der Betrachtung von Bild 6.138 zu gewinnenden Eindruck eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten maximalen Hauptspannungen entnommen werden.

Der Vergleich von Bild 6.139 und Bild 6.136 zeigt, dass in Bezug auf die maximalen Hauptspannungen eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den beiden unterschiedlichen Simula-

toren erreicht werden konnte als in Bezug auf die minimalen Hauptspannungen. Hierfür könnten möglicherweise die mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Berechnungsergebnisse verantwortlich sein. Während sowohl für die minimalen wie auch für die maximalen Hauptspannungen die Zahlenwertegraphen für die mit dem FTK-Simulator generierten Berechnungsergebnisse einen sehr ruhigen Verlauf aufweisen, schwanken die entlang der Streckenkontur mit dem Simulator FLAC^{3D} ermittelten minimalen Hauptspannungen zwischen benachbarten Gebirgszonen deutlich, woraus ein sehr unruhiger Verlauf des dazugehörigen Zahlenwertegraphen in Bild 6.136 resultiert. Für den Zahlenwertegraphen zur Abbildung der mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten maximalen Hauptspannungen entlang der Streckenkontur in Bild 6.139 lässt sich ein derart unruhiger Verlauf nicht feststellen. Somit wäre es denkbar, dass die mit Abstand größten relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die berechneten Hauptspannungen durch numerische Ungenauigkeiten bei der Verwendung des Simulators FLAC^{3D} im Bereich der Berechnung der minimalen Hauptspannungen zu Stande kommen.

Abschließend zur Diskussion des Ergebnisvergleichs in Bezug auf die maximalen Hauptspannungen lässt sich der Betrachtung von Bild 6.140 mit der Gesamtansicht der Stirnfläche des Berechnungsmodells entnehmen, dass die relativen Ergebnisabweichungen außerhalb des bisher in Bild 6.138 betrachteten Modellbereiches bezüglich der maximalen Hauptspannungen im nicht konturnahen Gebirge und in den Modellrandbereichen in einem Zahlenwertebereich von $-1,0 \% \leq \Delta\sigma_{\max_rel} \leq 1,0 \%$ liegen.

Mit Ausnahme der in einigen Bereichen der Streckenkontur berechneten Minimalspannungen kann somit für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell insgesamt eine als zufriedenstellend einzustufende Übereinstimmung zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Hauptspannungen festgestellt werden.

(d4) Differenzen bezüglich der Matrixausnutzungsgrade

Die drei bisher im vorliegenden Abschnitt diskutierten Zustandsgrößen bilden die Eingangsparameter zur Berechnung des Matrixausnutzungsgrades bezogen auf das Mohr-Coulomb'sche Bruchkriterium. Wie vorangehend in Abschnitt 6.4.3.5(d4) beschrieben wird, stellt der Matrixausnutzungsgrad eine im Bereich der Geomechanik essenziell wichtige Zustandsgröße zur Dimensionierung und Standsicherheitsbewertung von untertägigen Tragsystemen dar.

Während für die maximalen Hauptspannungen im Bereich der gesamten Bohrlochkontur sehr gute Übereinstimmungen zwischen den mit dem FTK-Simulator und den mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Simulationsergebnissen festgestellt werden konnten, sind, wie vorangehend beschrieben worden ist, in einigen Konturbereichen nicht zu vernachlässigende Abweichungen zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten minimalen Hauptspannungen und zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Porenwasserdrücken identifiziert worden. Der Vergleich der mit dem Simulator FLAC^{3D} und mit dem FTK-Simulator generierten Matrixausnutzungsgrade anhand der Betrachtung und Diskussion von Bild 6.141 bis Bild 6.143 vermittelt daher insbesondere auch einen Eindruck davon, in wie weit sich die bisher im Rahmen des Ergebnisvergleichs identifizierten Ergebnisunterschiede auf den gebirgsmechanisch sehr relevanten Bewertungsparameter *Matrixausnutzungsgrad* auswirken.

Entsprechend der bisher in diesem Abschnitt zur Anwendung gekommenen Vorgehensweise werden in Bild 6.141 die relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator FLAC^{3D} und den mit dem FTK-Simulator berechneten Matrixausnutzungsgraden in der Detailansicht der Streckenkontur und des unmittelbar die Strecke umgebenden Gebirges im Flächenplot dargestellt, bevor in Bild 6.142 eine Gegenüberstellung der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren ermittelten Matrixausnutzungsgrade im Konturschnitt in Diagrammform erfolgt und abschließend in Bild 6.143 die relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die Matrixausnutzungsgrade noch einmal im Flächenplot für das gesamte Modell dargestellt werden.

Der Betrachtung des Flächenplots in Bild 6.141 kann entnommen werden, dass die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der Matrixausnutzungsgrade im Zahlenwertebereich von $-5,5\% \leq \Delta_{\text{eta_rel}} \leq 5,6\%$ liegen. Damit ist festzuhalten, dass die Bandbreite der relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die Matrixausnutzungsgrade kleiner ist als in Bezug auf jede der zuvor betrachteten einzelnen Zustandsgrößen. Bezüglich der Größenordnung der relativen Ergebnisabweichungen liegt eine Vergleichbarkeit zwischen den für die größten Hauptspannungen ermittelten relativen Ergebnisabweichungen und den bezüglich der Matrixausnutzungsgrade ermittelten relativen Ergebnisabweichungen vor. Auch bezüglich der Anordnung der Bereiche entlang der Bohrlochkontur, in denen signifikante relative Ergebnisabweichungen identifiziert werden können, ähnelt die Darstellung der relativen Ergebnisabwei-

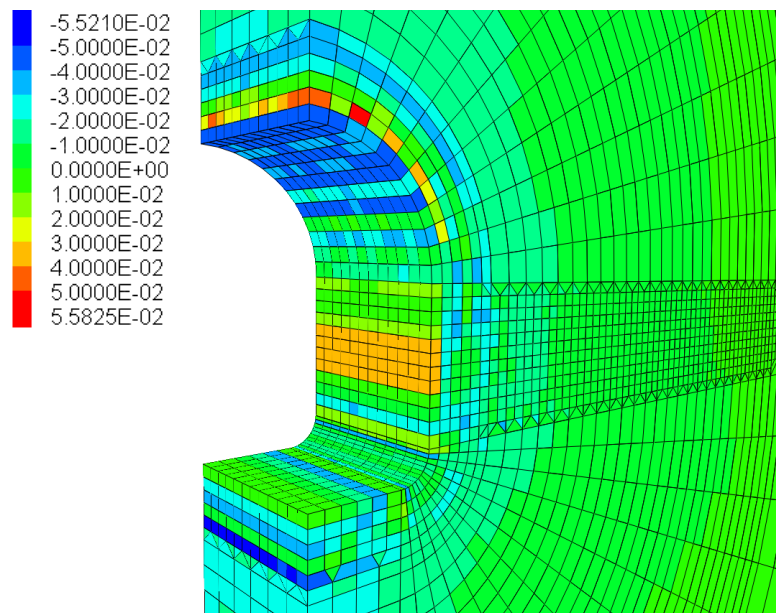


Bild 6.141: Detailansicht der Streckenkontur mit Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator berechneten, im stationären Zustand zum Zeitpunkt 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Matrixausnutzungsgraden – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der Matrixausnutzungsgrade bezogen auf den vom Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

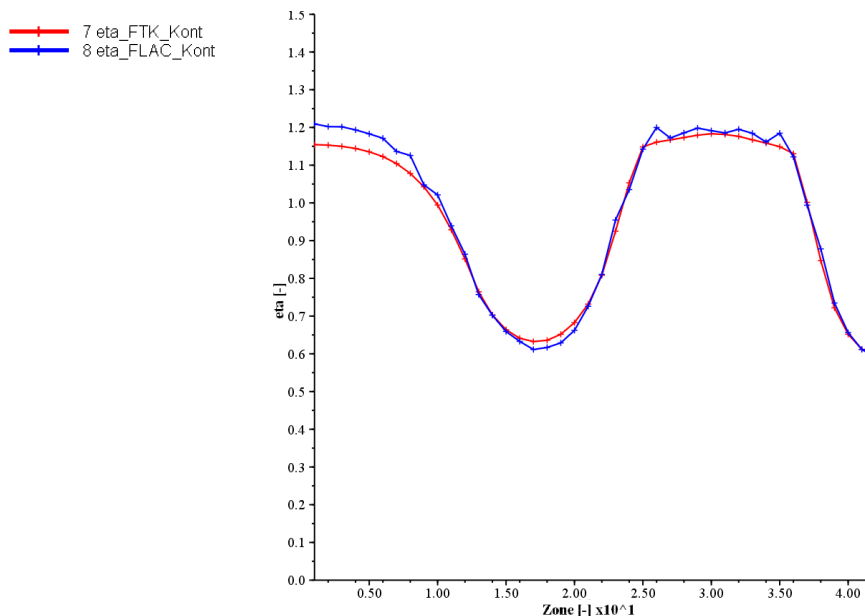


Bild 6.142: Gegenüberstellung der Verteilungen der Matrixausnutzungsgrade im stationären Zustand für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell im Konturschnitt (beginnend im First an der Kontur entlang über den Stoßbereich zur Sohle verlaufend) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ (blauer Graph) und dem FTK-Simulator (roter Graph)

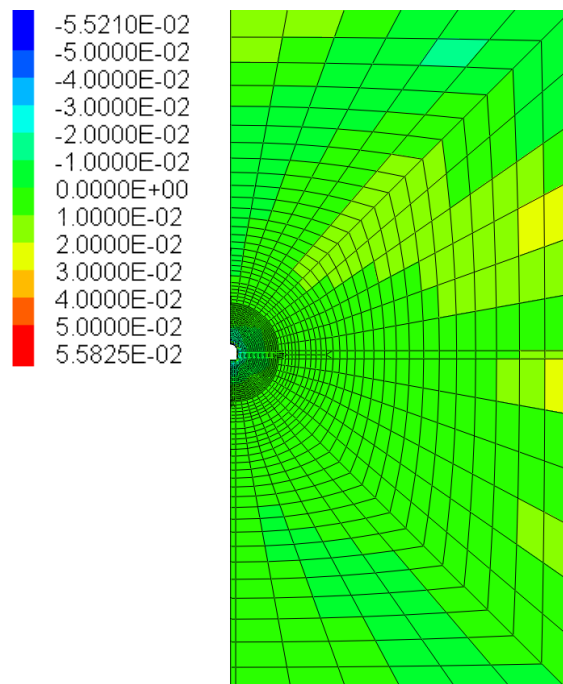


Bild 6.143: Totalansicht des Modells mit Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und dem FTK-Simulator berechneten, im stationären Zustand zum Zeitpunkt 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts vorherrschenden Matrixausnutzungsgraden – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben die relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der Matrixausnutzungsgrade bezogen auf den von $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwert an.

chungen in Bezug auf die Matrixausnutzungsgrade in Bild 6.141 eher der Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der maximalen Hauptspannungen in Bild 6.138 als den Darstellungen der relativen Ergebnisabweichungen für die minimalen Hauptspannungen oder für die Porenwasserdrücke in Bild 6.135 und Bild 6.132. Die vergleichende Betrachtung von Bild 6.141 und Bild 6.138 zeigt, dass sowohl in Bezug auf die maximalen Hauptspannungen wie auch in Bezug auf die Matrixausnutzungsgrade im Firstbereich der Streckenkontur die mit dem FTK-Simulator generierten Simulationsergebnisse unterhalb der mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ generierten Simulationsergebnisse liegen, während im zentralen Stoßbereich des Streckenabschnitts ein Gebirgsbereich identifiziert werden kann, in dem sowohl für die maximalen Hauptspannungen wie auch für die Matrixausnutzungsgrade die mit dem FTK-Simulator berechneten Zahlenwerte klar erkennbar oberhalb der mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ berechneten Zahlenwerte liegen.

Im Umfeld der gesamten Streckenkontur lassen sich unregelmäßig angeordnet einige weitere Gebirgszonen identifizieren, in denen relative Ergebnisabweichungen bezüglich der Matrix-



ausnutzungsgrade in der Größenordnung von $\Delta_{\text{rel}} \leq 5,0 \%$ berechnet worden sind. Relative Ergebnisabweichungen bezüglich der Matrixausnutzungsgrade in Größenordnungen von $\Delta_{\text{rel}} \leq 40 \%$, wie sie etwa für die Porenwasserdrücke oder bezüglich der minimalen Hauptspannungen zu ermitteln gewesen sind, lassen sich für keine der betrachteten Gebirgszonen feststellen.

In der großen Übereinstimmung, die zwischen den relativen Ergebnisabweichungen bezüglich der größten Hauptspannungen und bezüglich der Matrixausnutzungsgrade besteht, zeigt sich der dominante Einfluss der vorherrschenden größten Hauptspannungen auf die Berechnung der Matrixausnutzungsgrade. Für das hier vorgestellte generische Berechnungsbeispiel eines im Opalinuston des URL Mont Terri gelegenen Streckenabschnitts beruht die Dominanz der größten Hauptspannungen bei der Berechnung der Matrixausnutzungsgrade auf der Tatsache, dass die mechanischen Beanspruchungen auf das Gebirge deutlich oberhalb der hydraulischen Beanspruchungen des Gebirges liegen. Insbesondere gilt diese Aussage für den in diesem Abschnitt detailliert betrachteten Gebirgsbereich in der unmittelbaren Umgebung der Streckenkontur. Der Betrachtung von Bild 6.139, Bild 6.136 und Bild 6.133 kann entnommen werden, dass in den direkt entlang der Streckenkontur angeordneten Gebirgszonen im stationären Strömungszustand die maximalen Hauptspannungen die minimalen Hauptspannungen um durchschnittlich in etwa eine Größenordnung übertreffen und sogar in etwa durchschnittlich zwei Größenordnungen oberhalb der berechneten Porenwasserdrücke liegen. Somit ist festzuhalten, dass signifikante relative Ergebnisabweichungen nur für die beiden Zustandsgrößen ermittelt werden konnten, die im konturnahen Gebirgsbereich sehr niedrige Absolutwerte annehmen und somit bei der Berechnung der aus gebirgsmechanischer Sicht für die Beurteilung der Standsicherheit überaus wichtigen Matrixausnutzungsgrade eine gegenüber den maximalen Hauptspannungen untergeordnete Rolle spielen.

Die Betrachtung von Bild 6.142 bestätigt den bei der Betrachtung des Flächenplots in Bild 6.141 erhaltenen Eindruck einer grundsätzlich guten Übereinstimmung der mit dem FTK-Simulator und der mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Matrixausnutzungsgrade. Wie auch schon für die drei zuvor analysierten Zustandsgrößen weist der die mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Simulationsergebnisse repräsentierende Zahlenwertegraph einen etwas unruhigeren Verlauf auf als der zu den mit dem FTK-Simulator berechneten Simulationsergebnissen gehörige Zahlenwertegraph. Anhand der vergleichenden optischen Begutachtung der beiden Zahlenwertegraphen in Bild 6.142 lassen sich neben den beiden zuvor bereits be-

schriebenen Streckenkonturbereichen im First und im Stoß des Streckenabschnitts zusätzlich noch im Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle relativ große Ergebnisabweichungen identifizieren. Allerdings sind die Ergebnisabweichungen im Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle zum einen geringer als die im Firstbereich feststellbaren Ergebnisabweichungen und zum anderen lokal auf einzelne Gebirgszonen begrenzt.

Abschließend kann für den Vergleich der berechneten Matrixausnutzungsgrade aus Bild 6.143 die Darstellung der relativen Ergebnisabweichungen in Bezug auf die berechneten Matrixausnutzungsgrade im Flächenplot für das gesamte quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell in der Draufsicht auf die Stirnfläche des Modells entnommen werden. Die Betrachtung des Flächenplots in Bild 6.143 zeigt, dass, wie es aufgrund der in den vorangehenden Abschnitten diskutierten Simulationsergebnisse bezüglich der berechneten Porenwasserdrücke und bezüglich der berechneten Hauptspannungen zu erwarten gewesen ist, ausschließlich im konturnahen Gebirge signifikante relative Ergebnisabweichungen bezüglich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Matrixausnutzungsgrade existieren und dass in allen weiteren Bereichen des betrachteten Modells die relativen Ergebnisabweichungen in einem Zahlenwertebereich von $-1,0 \% \leq \Delta_{\text{rel}} \leq 1,0 \%$ variieren.

(e) Schlussfolgerungen

Im vorliegenden Abschnitt ist mit dem Vergleich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell generierten Zustandsgrößen der im Rahmen der Erstellung des vorliegenden Berichts durchzuführende, als Beitrag zur Validierung des FTK-Simulators dienende dreistufige Ergebnisvergleich zwischen dem neu entwickelten FTK-Simulator und dem etablierten kommerziellen Simulator FLAC^{3D} abgeschlossen worden. Der vorangehend im vorliegenden Abschnitt erfolgte Vergleich zwischen den Resultaten der beiden unterschiedlichen Simulatoren in Bezug auf die unterschiedlichen betrachteten Zustandsgrößen ist insgesamt als erfolgreicher Beitrag zur Validierung des neu entwickelten FTK-Simulators zu betrachten.

Insbesondere für die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten maximalen Hauptspannungen konnten innerhalb des gesamten Modells sehr gute Ergebnisübereinstimmungen festgestellt werden. Ähnlich gute Ergebnisübereinstimmungen wie für die maximalen Hauptspannungen sind darüber hinaus bezüglich der ebenfalls untersuchten Matrixausnut-



zungsgrade zu identifizieren gewesen. Etwas weniger gute, aber insgesamt dennoch als hinreichend gut zu betrachtende Ergebnisübereinstimmungen sind im Rahmen der bezüglich der generierten Porenwasserdruckverteilungen sowie bezüglich der generierten minimalen Hauptspannungsverteilungen durchgeführten Ergebnisvergleiche ermittelt worden. Für die beiden zuletzt genannten untersuchten Zustandsgrößen sind in einigen Modellbereichen durchaus als signifikant zu bezeichnende Abweichungen zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Simulationsergebnissen festgestellt worden. Dennoch als hinreichend übereinstimmend im Kontext des als Beitrag zur Validierung des FTK-Simulators durchgeführten Ergebnisvergleichs zu bezeichnen sind die bezüglich der minimalen Hauptspannungen und der Porenwasserdrücke erhaltenen Vergleichsergebnisse deshalb, weil die Bereiche mit den identifizierten signifikanten Ergebnisabweichungen in beiden Fällen räumlich stark begrenzt konturnah auftreten und in großen Teilen des Modells auch in Bezug auf die minimalen Hauptspannungen und die Porenwasserdrücke gute bis sehr gute Übereinstimmungen der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Simulationsergebnisse vorliegen. Große relative Ergebnisabweichungen zwischen den mit dem FTK-Simulator und den mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Simulationsergebnissen sind in Bezug auf die Porenwasserdrücke insbesondere in dem Übergangsbereich zwischen Firstbereich und Streckenstoß sowie im Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle aufgetreten. Besonders große Ergebnisabweichungen bezüglich der berechneten Minimalspannungen sind ebenfalls im Streckenstoß festzustellen gewesen, wobei jedoch auch in allen weiteren Bereichen der Streckenkontur unregelmäßig angeordnet vereinzelt signifikante relative Minimalspannungsabweichungen identifiziert werden konnten.

Auch wenn im Rahmen des vorliegenden Berichts die Resultate des Ergebnisvergleichs aufgrund der räumlichen Eingeschränktheit der Gebirgsbereiche mit signifikanten Ergebnisabweichungen als in hinreichender Übereinstimmung stehend bewertet werden können, erscheint es doch ratsam, die Ursachen für die in einigen Modellbereichen in Bezug auf einige der untersuchten Zustandsgrößen aufgetretenen Ergebnisabweichungen im Rahmen zukünftiger Forschungsarbeiten weiter zu untersuchen. Im Rahmen der zukünftigen Forschungsarbeiten sollte dann unbedingt eine vertiefende Befassung mit dem Einfluss von nicht *Voronoi*-artigen Modellstrukturen auf die mit dem FTK-Simulator generierten Simulationsergebnisse erfolgen.



6.4.3.8 Dreidimensionale Simulation zum Abteufen eines Bohrlochs im Nahfeld einer Strecke

(a) *Grundlegende Anmerkungen*

Nachdem im vorangehenden Abschnitt der erfolgreiche Vergleich der mit dem FTK-Simulator und der mittels des etablierten kommerziellen Simulators FLAC^{3D} für das quasi-zweidimensionale Bohrlochmodell, das dreidimensionale Bohrlochmodell und das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell generierten Berechnungsergebnisse ausführlich beschrieben worden ist, werden nachfolgend im vorliegenden Abschnitt die Berechnungen vorgestellt, die mit dem FTK-Simulator unter Verwendung des dreidimensionalen, kombinierten Bohrloch-Streckenmodells durchgeführt worden sind. Das zur Generierung der nachfolgend in diesem Abschnitt dargestellten Simulationsergebnisse verwendete dreidimensionale kombinierte Bohrloch-Streckenmodell ist in Abschnitt 6.4.3.1 in Bild 6.77 dargestellt.

Wie vorangehend in Abschnitt 6.4.3.1 bereits beschrieben worden ist, wird mit den numerischen Simulationsarbeiten unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells der Anforderungsbereich erreicht, in dem die Anwendung des Simulators FLAC^{3D} aufgrund von mangelnder Leistungsfähigkeit im Bereich der hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Analyse und den daraus resultierenden zu erwartenden sehr hohen Berechnungszeiten, die oberhalb der in der numerischen Simulation zu betrachtenden Zeiträume liegen, nicht mehr als sinnvoll zu erachten ist (Berechnungszeit > Realzeit!).

Der vorliegende Abschnitt ist in drei Hauptteile untergliedert. Im nachfolgenden ersten Unterabschnitt werden zunächst die Simulationsergebnisse der unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells durchgeführten Simulation des Ausbruchs des Streckenabschnitts vorgestellt. Zur Diskussion der Berechnungsergebnisse der Simulation des Streckenabschnittsausbruchs wird zuerst die zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdruckverteilung betrachtet, bevor im Anschluss daran die Porenwasserdruckverteilung, die Verteilungen der minimalen und maximalen Hauptspannungen und die Ausnutzungsgrade im stationären Strömungszustand sowie die zeitabhängige Entwicklung der Fluidbilanzen analysiert werden.

Die Analyse der vorangehend aufgelisteten ausgewählten Zustandsgrößen erfolgt zum Teil anhand eines Vergleichs zwischen den mit dem FTK-Simulator für das dreidimensionale kombinierte Bohrloch-Streckenmodell generierten Berechnungsergebnissen mit den mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell generierten Berechnungsergebnissen. Der Vergleich der mit dem FTK-Simulator für die beiden unterschied-



lichen Modelle berechneten Simulationsergebnisse erfolgt, um sicherzustellen, dass bei der Anwendung des FTK-Simulators unter Verwendung der beiden bezüglich der äußeren Modellabmessungen und bezüglich der Streckengeometrien identischen Modelle keine signifikante Ergebnisdifferenzen bedingt durch die im dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodell gegenüber dem quasi-zweidimensionalen Streckenabschnittsmodell zusätzlich vorhandene sehr feine Diskretisierung des Bohrlochs und des Gebirges in der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochs entstehen.

Im darauf folgenden zweiten Unterabschnitt werden ausgewählte Ergebnisse der Simulation des Bohrlochabteufens im Streckennahfeld vorgestellt. Im Rahmen der Ergebnisdiskussion für die Simulation des Bohrlochabteufens wird neben der zeitabhängigen Porenwasserdruckentwicklung in der Umgebung des Bohrlochs insbesondere auch der Einfluss der dreidimensionalen Simulation des Bohrlochabteufens auf einen innerhalb des Streckennahfelds im Gebirge liegenden Referenzquerschnitt detailliert analysiert.

Im dritten und letzten Unterabschnitt wird zur beispielhaften Darstellung der durch die Entwicklung des FTK-Simulators sowie durch die im Rahmen der Erstellung des vorliegenden Berichts durchgeführten Modellierungs- und Simulationsarbeiten geschaffenen geomechanischen Analysemöglichkeiten eine Variationsanalyse zum Einfluss der Orientierung des Schichtungsgefüges auf das Tragverhalten der Gebirgsmatrix und auf das Tragverhalten des Gebirges in den Schichtflächen anhand der Analyse der Matrix- und Schichtflächenausnutzungsgrade im kombinierten Tragsystem *Bohrloch-Strecke* vorgestellt. Insgesamt werden mit diesem Berechnungsmodell erste Vorarbeiten zur späteren Re-Analyse des im Rahmen der Bohrlochuntersuchungen beobachteten Bohrlochtragverhaltens vorgenommen.

(b) *Simulation des Ausbruchs des Streckenabschnitts*

(b1) *Zeitabhängige Porenwasserdruckentwicklung*

Die in Bild 6.144 bis Bild 6.147 zu betrachtenden Flächenplots zeigen zunächst die zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdruckverteilung zu den Simulationszeitpunkten 1 Tag, 128 Tage, 1024 Tage und 4096 Tage (stationärer Strömungszustand) nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts.

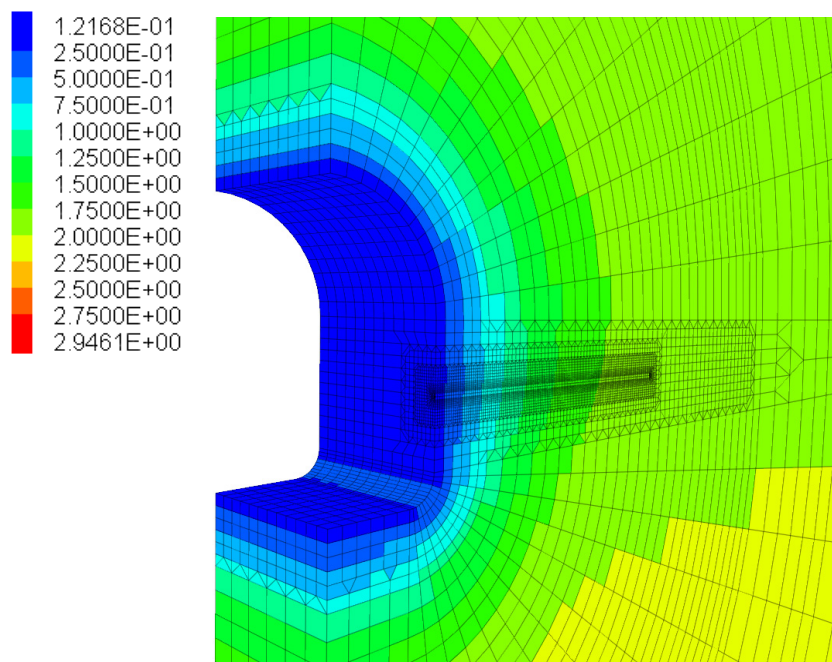


Bild 6.144: Porenwasserdruckverteilung einen Tag nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

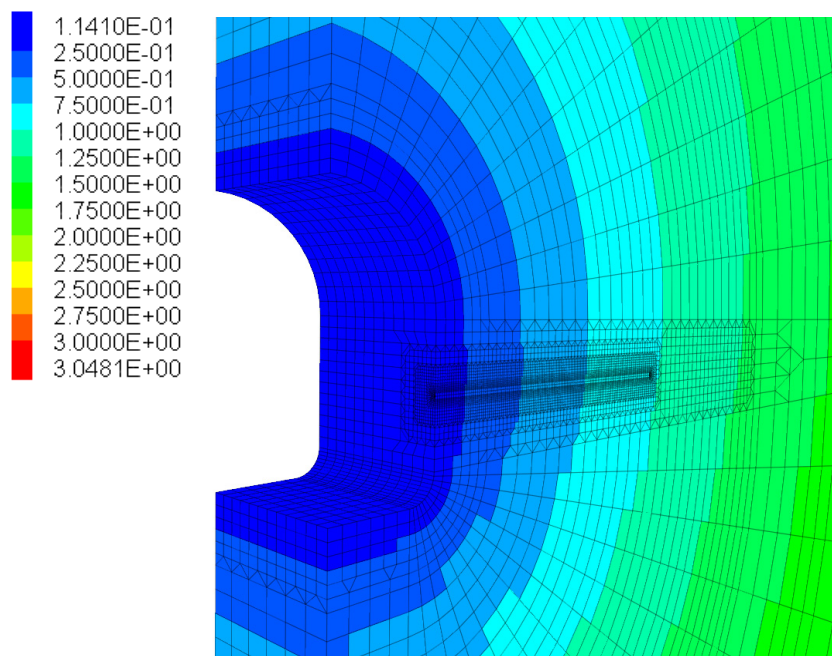


Bild 6.145: Porenwasserdruckverteilung 128 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

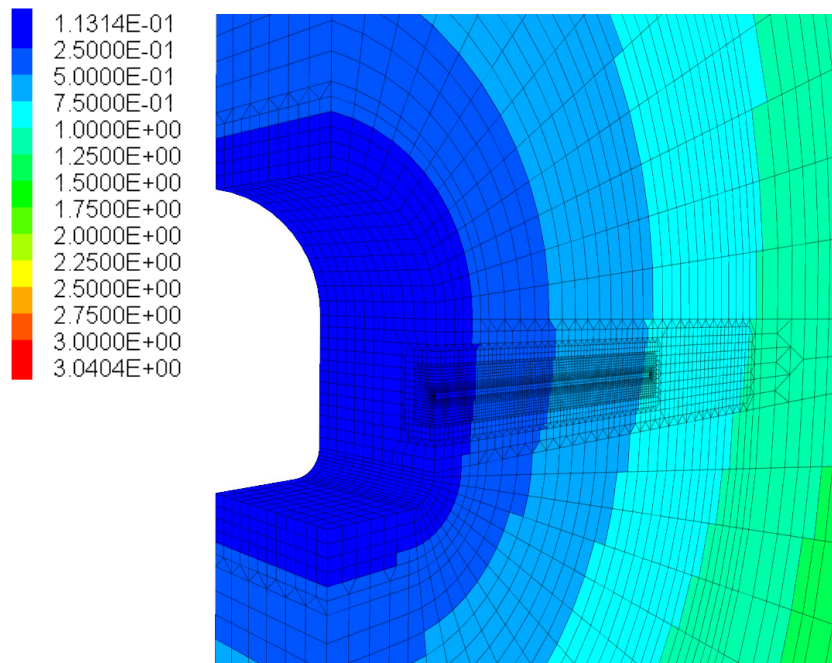


Bild 6.146: Porenwasserdruckverteilung 1024 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

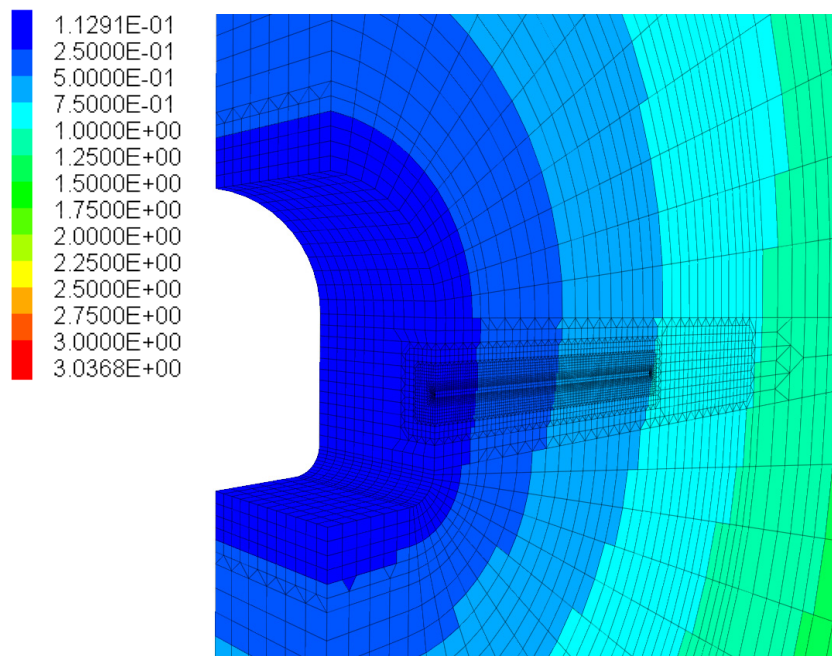


Bild 6.147: Porenwasserdruckverteilung im stationären Zustand 4096 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

Der vergleichenden Betrachtung der beiden Bilderserien von Bild 6.144 bis Bild 6.147 sowie von Bild 6.124 bis Bild 6.127 im vorangehenden Abschnitt 6.4.3.7(b) kann entnommen werden, dass die zur Erstellung des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells zusätzlich in das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell eingefügte sehr feine Diskretisierung zur Simulation des Bohrlochvortriebs keinen signifikanten Einfluss auf die zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdruckverteilung in der Umgebung des Streckenabschnitts hat.

Die Tatsache, dass zwischen Bild 6.146 und Bild 6.147 anhand der optischen Begutachtung keine erwähnenswerten Unterschiede zwischen den Porenwasserdruckverteilungen mehr identifiziert werden können, verdeutlicht, dass auch für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell vor dem Simulationszeitpunkt $t = 4096$ Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts der stationäre Strömungszustand erreicht worden ist. Für den innerhalb des stationären Strömungszustands gelegenen Simulationszeitpunkt $t = 4096$ Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts werden im nachfolgenden Abschnitt zwecks eines präziseren Vergleichs der generierten Porenwasserdrücke die für das quasi-zweidimensionale Streckenmodell und die für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell berechneten Porenwasserdrücke im Konturschnitt gegenübergestellt.

(b2) Vergleich ausgewählter relevanter Zustandsgrößen zwischen dem quasi-zweidimensionalen Streckenmodell und dem dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodell für den stationären Strömungszustand

Im vorliegenden Abschnitt werden ausgewählte Zustandsgrößen, die mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenmodell sowie für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell berechnet worden sind, anhand der Darstellung im Schnitt entlang der Streckenkontur miteinander verglichen. Bild 6.148 zeigt zunächst die Gegenüberstellung der Porenwasserdrücke im Konturschnitt.

Die Gegenüberstellung der mit dem FTK-Simulator für die beiden unterschiedlichen Modelle berechneten Porenwasserdrücke zeigt eine nahezu vollständige Übereinstimmung zwischen den berechneten Porenwasserdrücken in weiten Gebirgsbereichen entlang der Streckenkontur. Lediglich in dem Teil des Stoßbereichs der Strecke, in dem im dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodell die verfeinerte Diskretisierung zur späteren Simulation des Bohrlochabteufens eingebracht worden ist, unterscheiden sich die Zahlenwertegraphen im Diagramm in

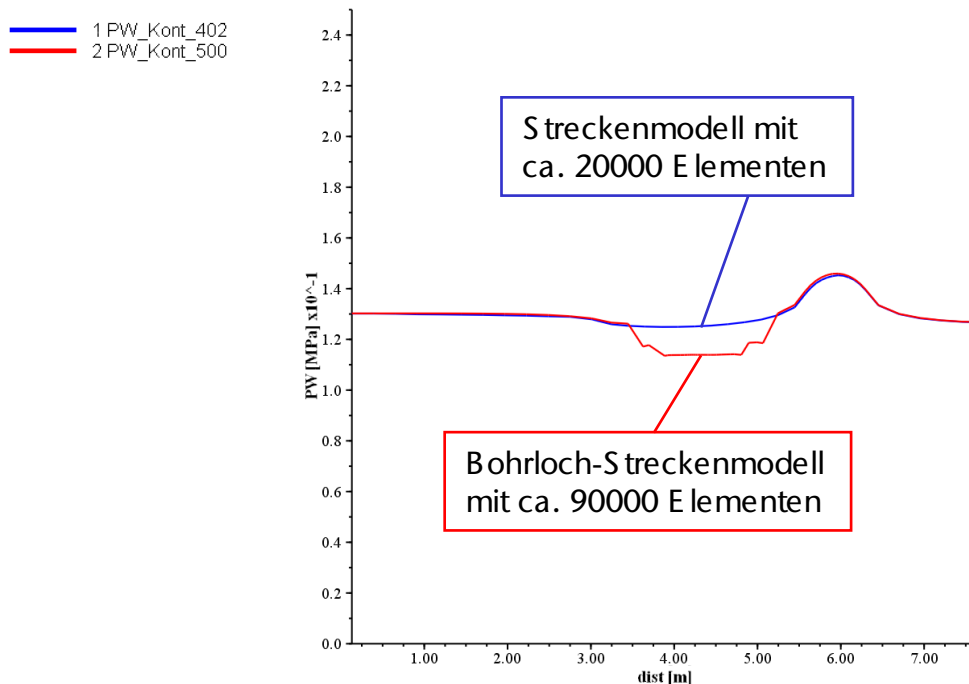


Bild 6.148: Gegenüberstellung der Porenwasserdruckverteilungen für den stationären Zustand im Konturschnitt (beginnend im First an der Kontur entlang über den Stoßbereich zur Sohle verlaufend) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenmodell (blauer Graph) und das dreidimensionale kombinierte Bohrloch-Streckenmodell (roter Graph)

Bild 6.148 deutlich erkennbar voneinander. Die Zahlenwerte für den Porenwasserdruck liegen im beschriebenen Bereich für das Bohrloch-Streckenmodell in etwa um $\Delta_{PW} = 0,2$ bar unterhalb von den für das Streckenmodell ermittelten Porenwasserdruckwerten. Die bei der vergleichenden Betrachtung der Zahlenwertegraphen der Porenwasserdrücke in Bild 6.148 festzustellenden Ergebnisdifferenzen sind jedoch nicht auf tatsächlich in den hydraulischen Potenzialfeldern wiederzufindende Porenwasserdruckdifferenzen zurückzuführen, sondern vielmehr darauf, dass die entlang der Streckenkontur angeordneten Zonen im Bohrloch-Streckenmodell innerhalb des Stoßbereiches mit der Diskretisierung zur Simulation des Bohrlochabteufens deutlich kleiner sind als die im Streckenmodell entlang der Streckenkontur angeordneten Zonen. Da bei der numerischen Simulation mit dem FTK-Simulator die Porenwasserdrücke in den Zonenschwerpunkten berechnet werden, bedeutet eine feinere Diskretisierung der einzelnen Gebirgsэлеmente entlang der Streckenkontur, dass die innerhalb des Konturschnitts dargestellten Porenwasserdrücke in einem feiner diskretisierten Gebirgsbereich näher an der Streckenkontur gelegenen Punkten innerhalb des Gebirges zuzuordnen sind. Somit können die bei der Begutachtung von Bild 6.148 identifizierbaren Abweichungen zwischen

den für die beiden unterschiedlichen Modelle berechneten Porenwasserdrücken mit der feineren Diskretisierung des Bohrloch-Streckenmodells im Stoßbereich der Strecke erklärt werden, sodass insgesamt von einer sehr guten Übereinstimmung der mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenmodell und für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell in Folge des Ausbruchs des Streckenabschnitts berechneten Porenwasserdruckverteilungen ausgegangen werden kann. Als Randbedingung gilt, dass an der Kontur selbst der Porenwasserdruck mit einem Zahlenwert von $PP_{RB} = 0,11$ MPa stets geringfügig oberhalb des atmosphärischen Luftdrucks liegen muss, um die Ausbildung eines im Rahmen der hier durchgeführten numerischen Untersuchungen unerwünschten Zweiphasenflusses im konturnahen Gebirgsbereich zu unterbinden.

In Bild 6.149 erfolgt dann weiter die Gegenüberstellung der minimalen sowie der maximalen Hauptspannungen im Konturschnitt.

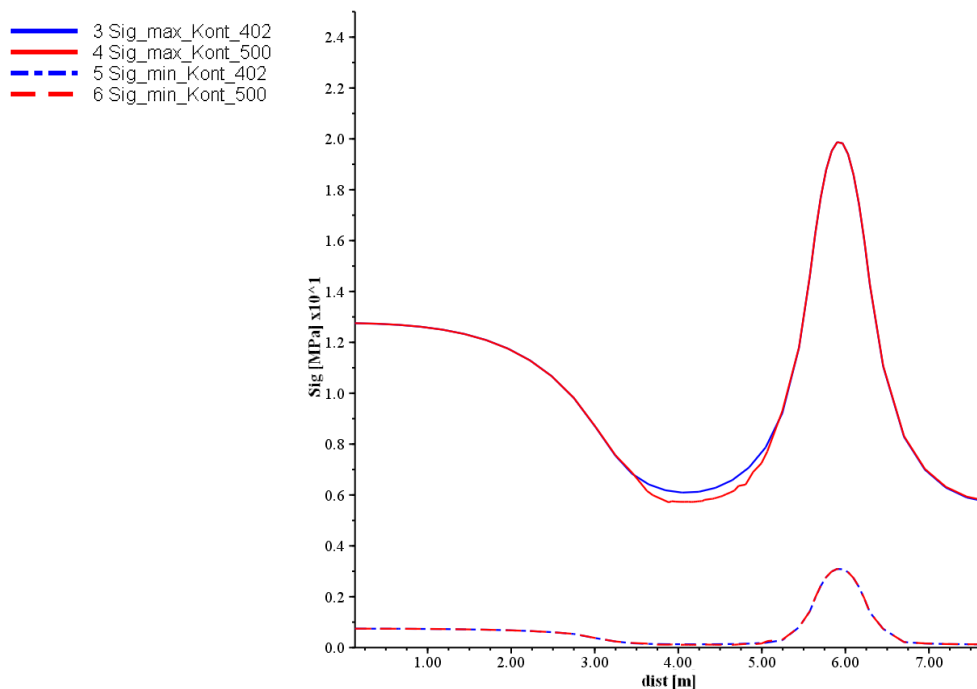


Bild 6.149: Gegenüberstellung der Hauptspannungsverteilungen für den stationären Zustand im Konturschnitt (beginnend im First an der Kontur entlang über den Stoßbereich zur Sohle verlaufend) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenmodell (blauer Graph – durchgehende Linie → σ_{max} ; gestrichelte Linie → σ_{min}) und das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell (roter Graph – durchgehende Linie → σ_{max} ; gestrichelte Linie → σ_{min})

Die Spannungsverteilungen für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell sind bereits in Abschnitt 6.4.3.7(d3) ausführlich diskutiert worden, sodass der Verlauf der Haupt-



spannungen entlang der Streckenkantur hier nicht noch einmal detailliert betrachtet wird, sondern der Fokus auf den Vergleich der mittels der beiden unterschiedlichen Modelle berechneten Hauptspannungsverläufe gelegt wird.

Die Gegenüberstellung der Zahlenwertgraphen in dem in Bild 6.149 zu betrachtenden Diagramm lässt im angewendeten Darstellungsmaßstab keinerlei Ergebnisunterschiede bezüglich der minimalen Hauptspannungen zwischen den mit dem FTK-Simulator für die beiden unterschiedlichen Modelle durchgeführten Berechnungen erkennen. Auch bei der Betrachtung der Zahlenwertgraphen der maximalen Hauptspannungen im Konturschnitt kann in fast allen Konturbereichen eine sehr gute Ergebnisübereinstimmung festgestellt werden. Lediglich in dem Teil des Stoßbereichs der Strecke, in dem die Diskretisierung des Bohrloch-Streckenmodells gegenüber dem Streckenmodell zur Simulation des Bohrlochabteufens stark verfeinert worden ist, können, wie es auch schon bezüglich der vorangehend diskutierten Porenwasserdruckverteilungen der Fall gewesen ist, Abweichungen zwischen den Simulationsergebnissen der mittels der beiden unterschiedlichen Modelle durchgeführten Berechnungen festgestellt werden. So ist bei der Betrachtung des Diagramms in Bild 6.149 festzustellen, dass im Stoßbereich der Strecke die mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenmodell generierten maximalen Hauptspannungen um $\Delta\sigma = 0,5 \text{ MPa}$ oberhalb der für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell berechneten maximalen Hauptspannungen liegen. Wie auch schon für die berechneten Porenwasserdrücke sind auch die Differenzen bezüglich der maximalen Hauptspannungen durch die unterschiedliche Feinheit der Diskretisierungen innerhalb der beiden zum Einsatz gekommenen Modelle und die damit verbundene unterschiedliche Positionierung der Zonenschwerpunkte der unmittelbar entlang der Streckenkantur gelegenen Zonen zu begründen.

Im Fall der betrachteten maximalen Hauptspannungen bildet sich ein näherungsweise radial-symmetrischer Gebirgstragring um das Maulprofil des Streckenabschnitts herum aus. Zwischen dem linear verlaufenden Streckenstoß sowie zwischen der linear verlaufenden Streckensohle und dem Gebirgstragring bilden sich im Gebirge Bereiche aus, in denen die maximalen Hauptspannungen in Richtung der Streckenkantur abnehmen. Daher ist es auch möglich, dass, wie der Betrachtung des Diagramms in Bild 6.149 zu entnehmen ist, in den näher an der Streckenkantur gelegenen Zonenschwerpunkten des feiner diskretisierten Bohrloch-Streckenmodells geringere maximale Hauptspannungen vorherrschen als in den Zonen-

schwerpunkten des entlang der Kontur grober diskretisierten quasi-zweidimensionalen Streckenmodells.

Wie zuvor in Abschnitt 6.4.3.7(d4) beschrieben, hat die in einer im Konturbereich einer un-
ausgebauten Hohlräume gelegenen Gebirgszone vorherrschende maximale Hauptspannung
einen großen Einfluss auf den innerhalb der Gebirgszone vorliegenden Matrixausnutzungs-
grad. Daher weisen, nachdem zuvor für die in Bild 6.149 zu betrachtenden Zahlenwertegra-
phen der maximalen Hauptspannungen eine sehr gute Übereinstimmung festgestellt werden
konnte, konsequenterweise auch die in Bild 6.150 gegenübergestellten Zahlenwertegraphen
der mit dem FTK-Simulator für die beiden unterschiedlichen Modelle berechneten Matrix-
ausnutzungsgrade sehr ähnliche Verläufe auf.

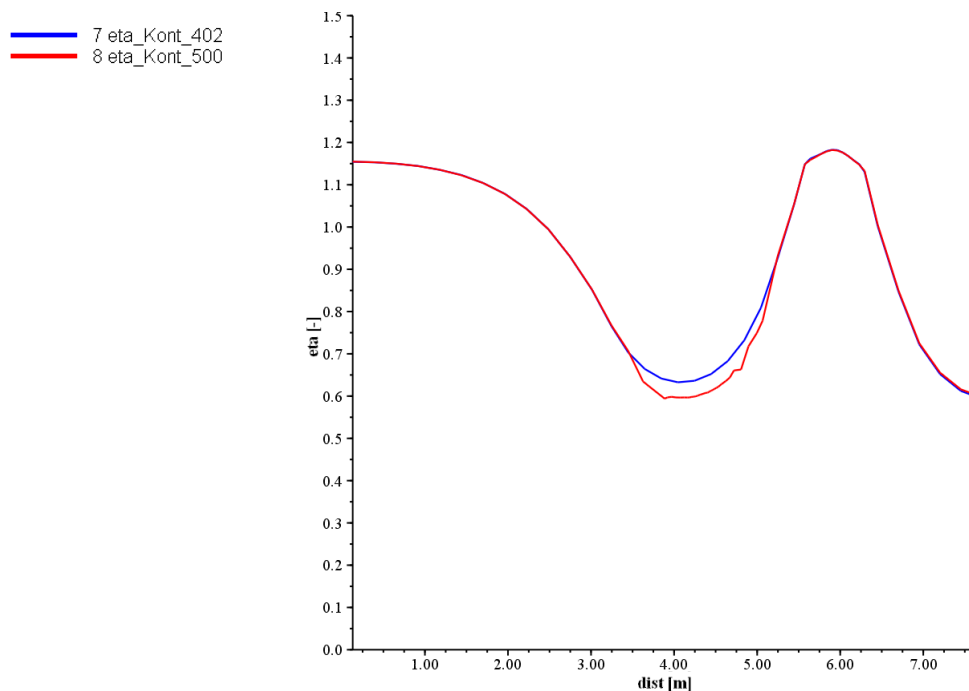


Bild 6.150: Gegenüberstellung der Ausnutzungsgrade für den stationären Zustand im Konturschnitt (beginnend im First an der Kontur entlang über den Stoßbereich zur Sohle verlaufend) für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation – berechnet mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenmodell (blauer Graph) und das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell (roter Graph)

Im Stoßbereich des Streckenabschnitts liegen die mit dem FTK-Simulator für das kombinierte Bohrloch-Streckenmodell berechneten Matrixausnutzungsgrade um $\Delta_{\text{eta}} \leq 5,0\%$ unterhalb der für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell berechneten Matrixausnutzungsgrade. Als Begründung für die bei der Berechnung für das Bohrloch-Streckenmodell generierten niedrigeren Matrixausnutzungsgrade im Stoßbereich kann die feinere Diskretisierung des

kombinierten Bohrloch-Streckenmodells im Vergleich zum quasi-zweidimensionalen Streckenabschnittsmodell angeführt werden. Aufgrund des geringeren Abstands der Zonenschwerpunkte im feiner diskretisierten Bereich des kombinierten Bohrloch-Streckenmodells liegen aufgrund der vorangehend beschriebenen Ausbildung eines Druckschattens im Stoßbereich der Strecke in den Zonenschwerpunkten geringere maximale Hauptspannungen vor, aus denen wiederum geringere Matrixausnutzungsgrade resultieren. Die mit der Ausbildung eines Druckschattens einhergehende Absenkung der maximalen Hauptspannungen im Stoßbereich der Strecke kann Bild 3.77 entnommen werden.

Abschließend für den Vergleich der mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell und das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell durchgeführten Berechnungen werden nachfolgend noch die Fluidbilanzen für die beiden unterschiedlichen Modelle betrachtet.

Die Fluidbilanz beschreibt zu einem vorgegebenen Zeitpunkt die Differenz aus dem Fluidvolumen, das über die Streckenkontur aus dem Modell heraus in die Strecke hineinströmt, und dem Fluidvolumen, das über die hydraulisch nicht gesperrten Modellränder dem Modell zuströmt. Die Fluidbilanz gibt somit Auskunft über das Volumen an Porenwasser, das sich nach dem Erreichen des stationären Strömungszustands weniger innerhalb des Modells befindet als unmittelbar zu Beginn der Strömungssimulation direkt nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts.

Da die beiden im vorliegenden Abschnitt miteinander verglichenen Modelle identische Modellgeometrien inklusive identischer Außenmaße sowie ebenfalls identische Streckenabmessungen aufweisen, ist davon auszugehen, dass für beide Modelle auch identische Fluidbilanzen berechnet werden sollten. Die Betrachtung von Bild 6.151 verdeutlicht jedoch, dass eine vollständige Übereinstimmung bezüglich der Fluidbilanzen zwischen den beiden unterschiedlichen Modellen nicht zu erreichen gewesen ist.

Bild 6.151 zeigt die zeitabhängige Entwicklung von fünf unterschiedlichen Fluidbilanzen. Bei der durch den schwarzen Zahlenwertegraph repräsentierten Fluidbilanz handelt es sich um die Fluidbilanz, die für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell unter Verwendung des Simulators FLAC^{3D} ermittelt worden ist. Der grüne Zahlenwertegraph repräsentiert die zeitabhängige Entwicklung der mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell ermittelten Fluidbilanz. Der vergleichenden Betrachtung des grünen

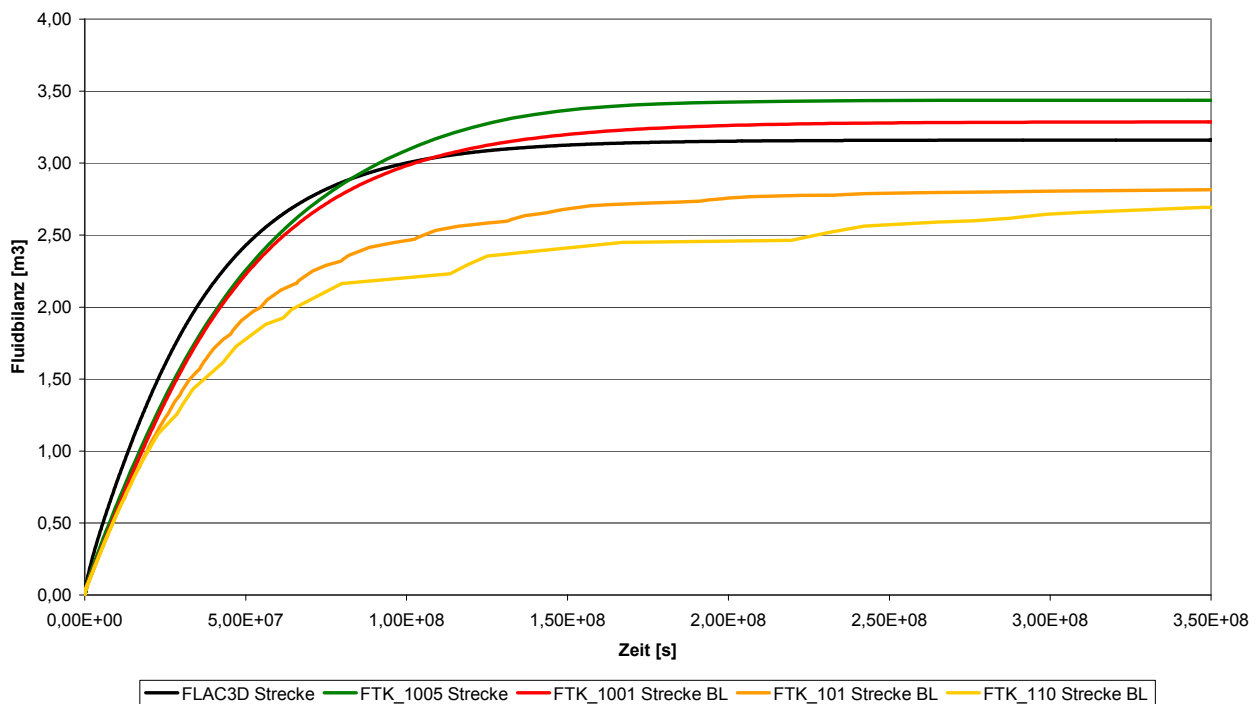


Bild 6.151: Fluidbilanzen für hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnungen bis zum Erreichen des stationären Zustandes mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ für das quasi-zweidimensionale Streckenmodell (schwarzer Graph), mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenmodell (grüner Graph) und mit dem FTK-Simulator für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell (gelber, orangefarbener und roter Graph)

und des schwarzen Zahlenwertgraphen in Bild 6.151 kann entnommen werden, dass sich bereits bei der Verwendung des quasi-zweidimensionalen Streckenabschnittsmodells Unterschiede bezüglich der Fluidbilanzen in Abhängigkeit vom angewendeten Simulator ergeben haben. Zwischen den Fluidbilanzen, die mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ und mit dem FTK-Simulator ermittelt worden sind, bestehen erkennbare Unterschiede sowohl bezüglich der zeitabhängigen Entwicklung wie auch bezüglich des Endwertes der berechneten Fluidbilanzen. Mit einem Endwert von $\Delta_{Vol} \approx 3,45 \text{ m}^3$ liegt die mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell generierte Fluidbilanz um etwa $\Delta_{\Delta Vol} \approx 8 \%$ oberhalb des unter der Verwendung des Simulators $FLAC^{3D}$ für die Fluidbilanz generierten Zahlenwertes.

Im Vergleich dazu betragen die Ergebnisabweichungen zwischen den vom Simulator $FLAC^{3D}$ für das in Abschnitt 6.4.3.5(b) vorgestellte quasi-zweidimensionale scheibenartige Bohrlochmodell berechneten Fluidbilanzen und den für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Bohrlochmodell mit dem FTK-Simulator berechneten Fluidbilanzen $\Delta_{\Delta Vol} \approx 4,8 \%$, wie Bild 6.80 in Abschnitt 6.4.3.5(b) zu entnehmen ist. Bedingt durch die Verwendung der beiden un-



terschiedlichen Simulatoren ergeben sich somit für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell quantitativ in etwa gleich große Ergebnisabweichungen wie für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Bohrlochmodell. Anhand des Vergleichs der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren für die beiden quasi-zweidimensionalen Berechnungsmodelle generierten Fluidbilanzen verdeutlicht sich, dass bedingt durch die Verwendung der zwei unterschiedlichen Simulatoren für identische Berechnungsmodelle Fluidbilanzdifferenzen in der Größenordnung von $4,8\% \leq \Delta_{\Delta Vol} \leq 8,0\%$ zustande kommen.

Der Vergleich zwischen dem roten Zahlenwertegraph in Bild 6.151, der die Fluidbilanzentwicklung nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für die Berechnung, die mit dem FTK-Simulator für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell durchgeführt worden ist, darstellt, und dem grünen Zahlenwertegraphen, der die für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell mit dem FTK-Simulator generierte zeitabhängige Entwicklung der Fluidbilanz widerspiegelt, zeigt, dass die mit dem FTK-Simulator für die beiden unterschiedlichen Modelle berechneten Gesamtfuidbilanzen um $\Delta_{\Delta Vol} \approx 4,5\%$ differieren. Die im Idealfall für die Berechnungen mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell und das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell generierten Fluidbilanzen zeigen somit Ergebnisabweichungen in der gleichen Größenordnung auf wie sie durch die Verwendung der beiden unterschiedlichen Simulatoren an identischen Modellen zustande gekommen sind. Interessanterweise liegt die durch den roten Zahlenwertegraph repräsentierte mit dem FTK-Simulator für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell berechnete Gesamtfuidbilanz sogar etwas näher an der mit dem Simulator FLAC^{3D} für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell berechneten Gesamtfuidbilanz (schwarzer Zahlenwertegraph) als an der mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell berechneten Gesamtfuidbilanz (grüner Zahlenwertegraph).

Neben den bisher diskutierten drei Zahlenwertegraphen in Bild 6.151 enthält das in Bild 6.151 zu betrachtende Diagramm zwei weitere Zahlenwertegraphen, deren Verlauf eher wenig an den der zuvor diskutierten Zahlenwertegraphen erinnert. Auf die Bedeutung der beiden weiteren unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells mit dem FTK-Simulator berechneten Fluidbilanzen wird in den nachfolgenden Ausführungen eingegangen.

In Abschnitt 6.4.3.4(d4) ist vorangehend die im Rahmen dieses Vorhabens gewählte Vorgehensweise zur Steuerung des hydraulischen Zeitschritts bei der Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen unter Verwendung des FTK-Simu-

lators geschildert worden. Im Rahmen der Erläuterung zur Vorgehensweise der Steuerung des hydraulischen Zeitschritts ist auch die Bedeutung des Zeitschrittsteigerungsfaktors erläutert worden. Während für das in Abschnitt 6.4.3.5 beschriebene quasi-zweidimensionale scheibenartige Berechnungsmodell eines Bohrlochs die Wahl des Zeitschrittsteigerungsfaktors nur einen relativ eingeschränkten Einfluss auf die bezüglich der Fluidbilanzen erhaltenen Ergebnistreubreiten gehabt hat, wobei sowohl nach oben wie auch nach unten für den Zeitschrittsteigerungsfaktor Grenzwerte festgestellt werden konnten, ab deren Über- bzw. Unterschreitung kein weiterer Einfluss der Veränderung des Zeitschrittsteigerungsfaktors auf die berechneten Fluidbilanzen mehr festgestellt werden konnte, ist für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell eine stärkere Abhängigkeit der berechneten Fluidbilanzen von der Wahl des Zeitschrittsteigerungsfaktors zu erkennen gewesen.

Neben den drei bisher diskutierten, mit dem FTK-Simulator und mit dem Simulator FLAC^{3D} für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell sowie für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell berechneten Fluidbilanzen enthält das in Bild 6.151 zu betrachtende Diagramm daher noch die zwei weiteren Zahlenwertegraphen. Die Zahlenwertegraphen repräsentierten gemeinsam mit dem vorangehend bereits beschriebenen roten Zahlenwertegraphen drei unterschiedliche, mit dem FTK-Simulator für das dreidimensionale Bohrlochscheibenmodell berechnete Fluidbilanzen.

Zur Durchführung der drei unterschiedlichen Berechnungen ist jeweils ein anderer Zeitschrittsteigerungsfaktor verwendet worden. Die durch den gelben Zahlenwertegraphen repräsentierte Fluidbilanz ist bei der Verwendung eines Zeitschrittsteigerungsfaktors von $F_{St} = 1,1$ ermittelt worden, der orangefarbene Zahlenwertegraph spiegelt die zeitabhängige Entwicklung der Fluidbilanz wieder, die unter Verwendung eines Zeitschrittsteigerungsfaktors von $F_{St} = 1,01$ berechnet worden ist und der rote Zahlenwertegraph visualisiert die zeitabhängige Entwicklung der Fluidbilanz, die sich für die Anwendung eines Zeitschrittsteigerungsfaktors von $F_{St} = 1,001$ ergibt. Die vergleichende Betrachtung der drei für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell berechneten Fluidbilanzen in Bild 6.151 zeigt einen signifikanten Einfluss des Zeitschrittsteigerungsfaktors auf die mit dem FTK-Simulator berechneten Fluidbilanzen. Die relativen Ergebnisabweichungen zwischen den unter der Verwendung eines Zeitschrittsteigerungsfaktors von $F_{St} = 1,1$ und unter der Verwendung eines Zeitschrittsteigerungsfaktors von $F_{St} = 1,001$ berechneten Gesamtfluidbilanzen beträgt $\Delta_{\Delta Vol} \approx 18 \%$. Deutlich ist dabei erkennbar, dass die berechnete Gesamtfluidbilanz sich umso mehr an den für das quasi-



zweidimensionale Streckenabschnittsmodell mit dem FTK-Simulator und mit dem Simulator FLAC^{3D} bezüglich der Gesamtfluidbilanzen generierten Zahlenwertebereich annähert, um so kleiner der Zeitschrittsteigerungsfaktor gewählt wird. Neben der Tatsache, dass sich der bei der Verwendung des Zeitschrittsteigerungsfaktors von $F_{St} = 1,001$ für die Gesamtfluidbilanz generierte Zahlenwert deutlich eher dem zuvor mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell berechneten Zahlenwertebereich annähert, weist der die zeitabhängige Entwicklung der unter Verwendung des Zeitschrittsteigerungsfaktors von $F_{St} = 1,001$ repräsentierende Zahlenwertegraph auch einen deutlich ruhigeren Verlauf auf, als die Zahlenwertegraphen der unter Verwendung der beiden größeren Zeitschrittsteigerungsfaktoren generierten Fluidbilanzen.

Tatsächlich nimmt mit fortschreitendem Porenwasserdruckabbau innerhalb des Gebirges und der Annäherung an den stationären Strömungszustand die dem untertägigen Hohlraum entlang seiner Kontur zutretende Wassermenge kontinuierlich ab, woraus zwangsläufig eine ebenfalls kontinuierliche Abnahme des Wachstums der Fluidbilanz resultieren muss. Aus der kontinuierlichen Abnahme des Fluidbilanzwachstums im Laufe der zeitlichen Annäherung an den stationären Strömungszustand resultiert automatisch eine beinahe asymptotische Annäherung einer korrekt berechneten Fluidbilanz an einen Grenzwert, der allerdings anders als bei einer tatsächlich asymptotischen Annäherung im Verlauf der Durchführung der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnung auch erreicht wird – und zwar zum Zeitpunkt des Erreichens des stationären Strömungszustands.

Von den im Diagramm in Bild 6.151 zur Visualisierung der Fluidbilanzen für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell dargestellten Zahlenwertegraphen weist lediglich der rote, bei der Verwendung des Zeitschrittsteigerungsfaktors von $F_{St} = 1,001$ generierte Zahlenwertegraph einen bis zum Erreichen eines Maximalwertes näherungsweise asymptotischen Verlauf auf.

Da zum einen der Verlauf des Zahlenwertegraphen, der bei der Verwendung des Zeitschrittsteigerungsfaktors $F_{St} = 1,001$ generiert worden ist, den gleichmäßigsten und aufgrund der vorangehenden Ausführungen auch sinnvollsten Verlauf aufweist und zum anderen der bei der Verwendung des Zeitschrittsteigerungsfaktors $F_{St} = 1,001$ erreichte Zahlenwert für die Gesamtfluidbilanz im Gegensatz zu den unter Verwendung der Zeitschrittsteigerungsfaktoren $F_{St} = 1,01$ und $F_{St} = 1,1$ berechneten Zahlenwerten der Gesamtfluidbilanzen auch im Zahlenwertebereich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren für das quasi-zweidimen-



sionale Streckenabschnittsmodell berechneten Gesamtfluidbilanzen liegt, kann davon ausgegangen werden, dass für die in Bild 6.151 dargestellten, mittels des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells durchgeführten Berechnungen die unter Verwendung des Zeitschrittsteigerungsfaktors $F_{St} = 1,001$ erhaltenen Berechnungsergebnisse die realistischsten und somit auch die besten Berechnungsergebnisse sind.

Aufgrund der Tatsache, dass die für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell unter Verwendung des Zeitschrittsteigerungsfaktors $F_{St} = 1,001$ durchgeführte numerische Simulation eine Echtzeit von $t_B = 18$ Tagen in Anspruch genommen hat, ist im Rahmen der Anfertigung des vorliegenden Berichts aus zeitlichen Gründen darauf verzichtet worden, weitere Berechnungsvariationen mit noch kleineren Zeitschrittsteigerungsfaktoren durchzuführen. Alle nachfolgend im vorliegenden Abschnitt für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell dargestellten Simulationsergebnisse sind daher unter Verwendung des Zeitschrittsteigerungsfaktors $F_{St} = 1,001$ ermittelt worden.

(b3) Schlussfolgerungen aus dem Vergleich ausgewählter relevanter Zustandsgrößen zwischen dem quasi-zweidimensionalen Streckenmodell und dem dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodell für den stationären Strömungszustand

Im Rahmen des vorangehend im vorliegenden Abschnitt durchgeführten Ergebnisvergleichs sind in erster Linie die Zustandsgrößen unmittelbar im Bereich der Streckenkontur, die mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell und für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell berechnet worden sind, miteinander verglichen worden. Der Ergebnisvergleich zwischen den für die beiden unterschiedlichen Modelle berechneten Zustandsgrößen ist durchgeführt worden, um vor der Simulation des Bohrlochabteufens im kombinierten dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodell mit der zusätzlich implementierten Diskretisierung für das Bohrloch die Ergebnisse der Simulation des Streckenabschnittsausbruchs auf ihre grundsätzliche Übereinstimmung mit den vorherigen Berechnungsdaten hin überprüfen zu können. Da das im nachfolgenden Schritt numerisch zu untersuchende Bohrloch sich im Streckennahfeld befindet, ist im Rahmen des durchgeführten Ergebnisvergleichs mit der Gegenüberstellung der Berechnungsergebnisse im Konturschnitt dem streckennahen Modellbereich besondere Aufmerksamkeit zuteil geworden. Aufgrund der sehr guten Übereinstimmung der untersuchten ausgewählten Zustandsgrößen für die unter Verwendung des zweidimensionalen Streckenabschnittsmodells sowie für die unter Verwen-



dung des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells durchgeführten Berechnungen ist der vorangehend beschriebene Ergebnisvergleich insgesamt als erfolgreich zu betrachten, sodass im Rahmen der Durchführung der numerischen Simulationsarbeiten mit der dreidimensionalen Simulation des Bohrlochabteufens der im nachfolgenden Abschnitt beschriebene nächste Schritt erfolgen kann.

Einzig bezüglich der berechneten Gesamtfluidbilanzen sind im Rahmen des durchgeführten Ergebnisvergleichs deutlich identifizierbare Ergebnisunterschiede zwischen den mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell und den mit dem FTK-Simulator für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell durchgeführten Berechnungen aufgetreten. Im Rahmen weiterer numerischer Simulationsarbeiten und insbesondere im Rahmen der Weiterentwicklung des FTK-Simulators wird in Zukunft zu untersuchen sein, in wie weit sich die nicht *Voronoi*-artige Diskretisierung des Bohrlochs und des Gebirgsbereiches in der Umgebung des Bohrlochs im dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodell auf die generierten Berechnungsergebnisse auswirkt und in wie weit gegebenenfalls durch eine weitere Ertüchtigung des FTK-Simulators eine bessere Annäherung der für die beiden unterschiedlichen Modelle berechneten Fluidbilanzen erreicht werden kann.

(c) *Simulation des Abteufens des Bohrlochs*

(c1) *Grundlegende Anmerkungen*

Nach der im vorangehenden Abschnitt 6.4.3.8(b) beschriebenen und als erfolgreich anzusehenden Gegenüberstellung der mit dem FTK-Simulator für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell und der für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell generierten ausgewählten Zustandsgrößen werden im vorliegenden Abschnitt nun ausgewählte Resultate der mit dem FTK-Simulator unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells durchgeführten numerischen Simulation des Bohrlochabteufens vorgestellt. Somit beginnt im vorliegenden Abschnitt die Befassung mit dem Teil der numerischen Simulationsarbeiten, für die keinerlei Möglichkeit einer Überprüfung der Simulationsergebnisse anhand eines Vergleichs mit den mittels eines anderen Simulators oder unter Verwendung eines bezüglich der vorliegenden geometrischen Konfiguration vergleichbaren, aber vom Aufbau der Diskretisierung her weniger komplexen Modells generierten Simulationsergebnissen mehr bestanden hat. Die nachfolgend vorgestellten ausgewählten Ergebnisse der Simulation des Bohrlochvortriebs können somit aufgrund der Komplexität des zu simulierenden Gesamtsys-

tems lediglich im Rahmen einer qualitativ ausgerichteten Betrachtung bezüglich ihrer grundsätzlichen Plausibilität aus geomechanischer Sicht untersucht werden. Die nachfolgende Darstellung von mit dem FTK-Simulator unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells erhaltenen ausgewählten Simulationsergebnissen erfolgt zum einen zur qualitativen Überprüfung der generierten Berechnungsergebnisse und zum anderen zur Veranschaulichung der Möglichkeiten, die sich bezüglich der Analyse des Tragverhaltens von komplexen, aus mehreren sich gegenseitig in ihrem Tragverhalten beeinflussenden Hohlräumen bestehenden untertägigen Tragsystemen durch die im Rahmen der Erarbeitung des vorliegenden Berichts durchgeführten numerischen Entwicklungsarbeiten und Modellierungsarbeiten eröffnet haben.

Im Rahmen der Diskussion der für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell generierten Berechnungsergebnisse wird nachfolgend in Abschnitt 6.4.3.8(c2) zunächst die zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdruckverteilung in der Umgebung des kombinierten untertägigen Tragsystems *Bohrloch-Strecke* während und nach der Simulation des Bohrlochabteufens anhand der Darstellung des Porenwasserdrucks im Flächenplot zu unterschiedlichen Simulationszeitpunkten vorgestellt. Im Anschluss erfolgt in Abschnitt 6.4.3.8(c3) die Darstellung und Diskussion der Gesamtfluidbilanz für das kombinierte dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell. Zur Verdeutlichung der Auswirkungen von dreidimensionalen Effekten wie beispielsweise dem Lastabtrag durch das vor der Ortsbrust oder vor dem Bohrlochtiefsten gelegene Gebirge wird in Abschnitt 6.4.3.8(c4) die Veränderung ausgewählter Zustandsgrößen im Bereich eines Referenzquerschnitts vor, während und nach dem Durchfahren im Rahmen des Bohrlochabteufens untersucht. Abschließend werden in Abschnitt 6.4.3.8(d) Analysevariationen zum Einfluss einer schichtungsgefügebedingten Materialanisotropie auf das Tragverhalten des kombinierten Tragsystems *Bohrloch-Strecke* vorgestellt.

(c2) *Zeitabhängige Porenwasserdruckentwicklung*

In der Bilderserie von Bild 6.152 bis Bild 6.155 kann die zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdruckverteilung in der Umgebung des Tragsystems *Bohrloch-Strecke* zu unterschiedlichen Simulationszeitpunkten während und nach der Simulation des Bohrlochabteufens betrachtet werden.

Als Ausgangssituation für die Simulation des Bohrlochabteufens ist der innerhalb des stationären Strömungszustands gelegene Simulationszeitpunkt $t = 4096$ Tage nach dem Ausbruch



des Streckenabschnitts, der vorangehend in Abschnitt 6.4.3.8(b) ausführlich diskutiert worden ist, ausgewählt worden. Ausgehend von diesem Simulationszeitpunkt ist anschließend ein sechsständiger Zeitraum, in dem das Abteufen des Bohrlochs erfolgt, simuliert worden. Somit ist das Abteufen des Bohrlochs im Stoß des Streckenabschnitts mit einer Bohrgeschwindigkeit von $v_d = 1$ m/h simuliert worden.

Nachfolgend wird, wie vorangehend bereits erwähnt worden ist, in Abschnitt 6.4.3.8(c4) ein in $\Delta t_{BL} = 0,4$ m Abstand zum Bohrlochtiefsten und somit in einer Teufe von $t_{BL} = 5,6$ m gelegener Gebirgsquerschnitt detailliert ausgewertet. Der in Bild 6.152 zu betrachtende Flächenplot zeigt die Porenwasserdruckverteilung während des Bohrlochabteufens bei einem Stand des Bohrlochtiefsten in einer Teufe von $t_{BL} = 5,0$ m und somit $\Delta t_{BL} = 0,6$ m vor dem Durchfahren des detailliert ausgewerteten Referenzquerschnitts, während der in Bild 6.153 zu betrachtende Flächenplot die Porenwasserdruckverteilung unmittelbar nach dem Erreichen der Endteufe von $t_{BL} = 6,0$ m und somit $\Delta t_{BL} = 0,4$ m nach dem Durchfahren des Referenzquerschnitts darstellt.

Aus der großen Ähnlichkeit des Erscheinungsbildes der beiden Flächenplots in Bild 6.152 und Bild 6.153 kann geschlussfolgert werden, dass abgesehen vom Absinken des Porenwasserdrucks unmittelbar im Bereich der im Zuge des Abteufens neu entstandenen Bohrlochkontur im Teufenbereich von $5,0 \text{ m} \leq t_{BL} \leq 6,0 \text{ m}$ keine weiteren nennenswerten Änderungen des hydraulischen Potenzialfeldes eingetreten sind. Auch bei der relativ großen, für die hier vorgestellten numerischen Simulationen verwendeten Gebirgspermeabilität von $k_f = 10^{-10}$ m/s ist die Betrachtung größerer Strömungszeiträume notwendig, um deutliche strömungsbedingte Veränderungen bezüglich des hydraulischen Potenzialfelds anhand der optischen Begutachtung von Flächenplots in einem Maßstab, wie er für die Darstellungen in Bild 6.152 bis Bild 6.155 verwendet wird, identifizieren zu können. So zeigt der Flächenplot in Bild 6.154 eine deutliche Veränderung des hydraulischen Potenzialfelds in der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochs zum Zeitpunkt $t = 128$ Tage nach Vollendung der Simulation des Bohrlochabteufens gegenüber dem in Bild 6.153 zu betrachtenden hydraulischen Potenzialfeld, das zum Simulationszeitpunkt unmittelbar nach der Fertigstellung des Bohrlochabteufens vorherrscht. Im Flächenplot in Bild 6.155 ist die Porenwasserdruckverteilung in der Umgebung des Tragsystems *Bohrloch-Strecke* zu dem innerhalb des nach dem Abteufen des Bohrlochs erreichten stationären Strömungszustands gelegenen Simulationszeitpunkt $t = 2048$ Tage nach der Simulation des Bohrlochabteufens zu betrachten.

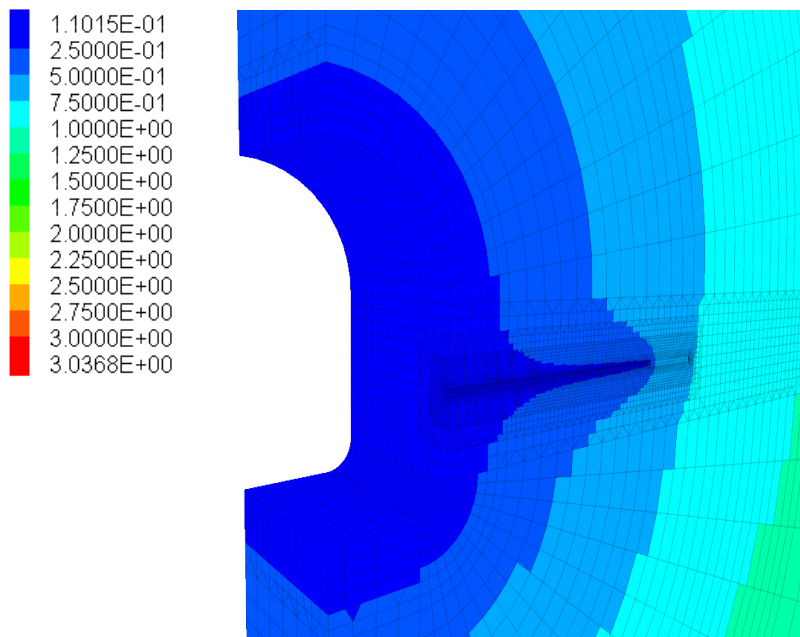


Bild 6.152: Porenwasserdruckverteilung während des Abteufens des Bohlochs, zum Zeitpunkt 4096 Tage und 5 Stunden nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell im Flächenplot – hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

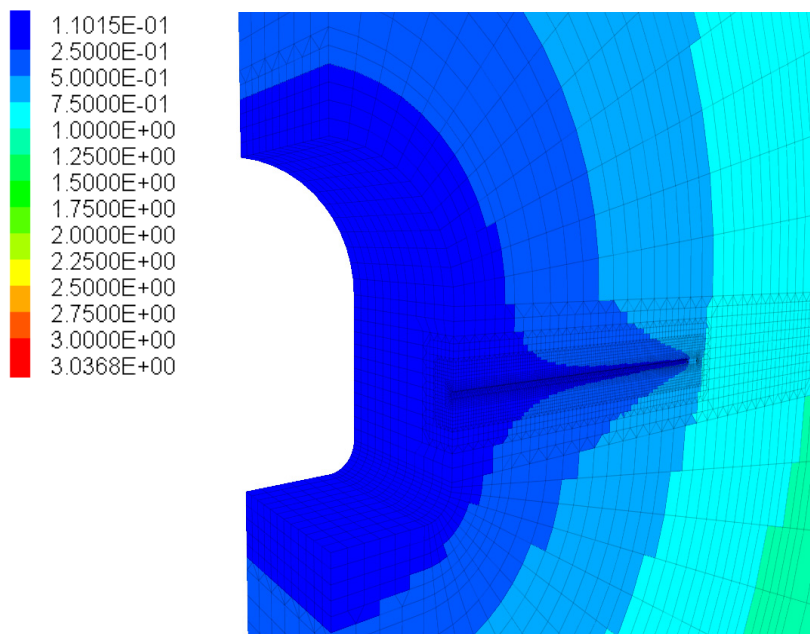


Bild 6.153: Porenwasserdruckverteilung während des Abteufens des Bohlochs, zum Zeitpunkt 4096 Tage und 6 Stunden nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell im Flächenplot – hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

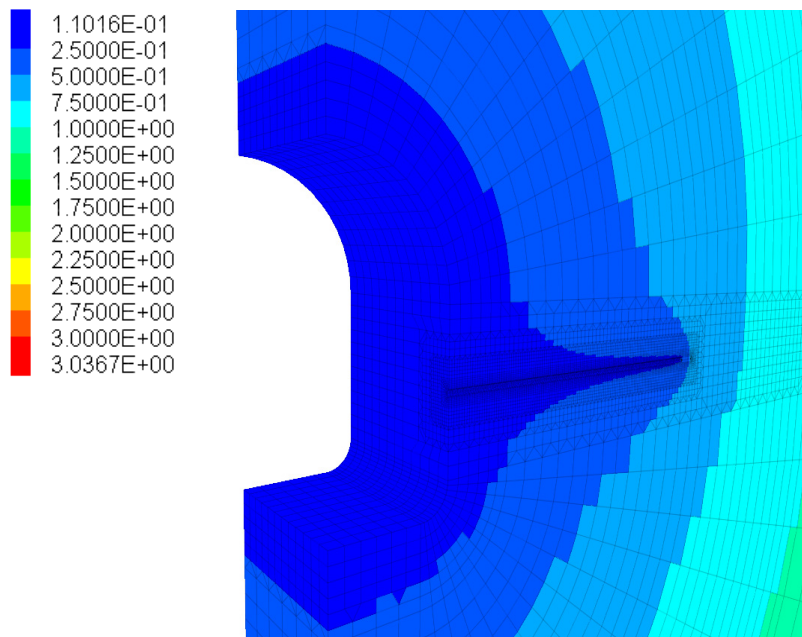


Bild 6.154: Porenwasserdruckverteilung zum Zeitpunkt 128 Tage nach dem Abteufen des Bohrlochs für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell im Flächenplot – hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.

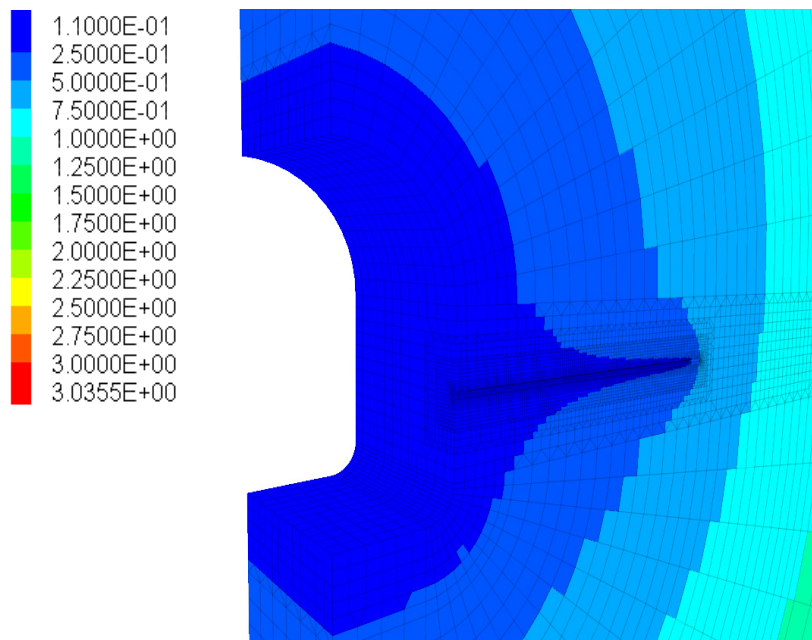


Bild 6.155: Porenwasserdruckverteilung im stationären Zustand zum Zeitpunkt 2048 Tage nach dem Abteufen des Bohrlochs für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell im Flächenplot für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator – Die zur dargestellten Farbskala gehörigen Zahlenwerte geben den Porenwasserdruck in MPa an.



Bei der Betrachtung der Bilderserie von Bild 6.152 bis Bild 6.155 sind keine signifikanten Veränderungen der Porenwasserdrücke in den bohrlochferneren Gebirgsbereichen zu erkennen. Auch die Porenwasserdrücke im Gebirge entlang des Firstbereichs des Streckenabschnitts oder im Gebirge unterhalb der Streckensohle scheinen nicht signifikant durch das Abteufen des Bohrlochs und die damit einhergehend einsetzende Strömung beeinflusst zu werden. Die Betrachtung der Serie von Flächenplots in Bild 6.152 bis Bild 6.155 verdeutlicht somit, dass das Bohrloch mit seinem Radius von $r = 0,0505$ m einen gegenüber der deutlich größeren Strecke mit einem Firstgewölberadius von $r = 2,0$ m nur vergleichbar kleinen Einfluss auf das gesamte im kombinierten Bohrloch-Streckenmodell vorherrschende hydraulische Potenzialfeld ausübt.

(c3) Fluidbilanz

Die Gesamtfluidbilanz für die mit dem dreidimensionalen kombinierten Bohrloch-Streckenmodell durchgeführten numerischen Simulationen bestehend aus der Simulation des Streckenabschnittsausbruchs und der Simulation des Bohrlochabteufens kann der Betrachtung von Bild 6.156 entnommen werden.

Die Fluidbilanz für die Simulation des Ausbruchs des Streckenabschnitts unter Verwendung des kombinierten Bohrloch-Streckenmodells kann auch in Bild 6.151 betrachtet werden und ist bereits in Abschnitt 6.4.3.8(b2) ausführlich beschrieben worden. In Bild 6.156 ist sie in Kombination mit der Darstellung der Fluidbilanz für die Simulation des Bohrlochabteufens erneut zu betrachten. Der erneute Anstieg des Fluidbilanzgraphen nach dem Erreichen des ersten stationären Strömungszustands erfolgt im Anschluss an das Abteufen des Bohrlochs zum Simulationszeitpunkt $t = 4096$ Tage. Insgesamt erhöht sich die kombinierte, aus Streckenabschnittsausbruch und Bohrlochabteufen resultierende Fluidbilanz durch den im Anschluss an das Bohrlochabteufen stattfindenden Strömungsprozess von einem Zahlenwert von $\Delta_{Vol} = 3,2$ m³ auf einen Zahlenwert von $\Delta_{Vol} = 3,5$ m³, bevor nach einem weiteren Zeitraum von $\Delta t \approx 2000$ Tagen erneut ein stationärer Strömungszustand erreicht wird. Während sich nach dem Abschluss des durch den Streckenabschnittsausbruch bedingten Porenwasserdruckabbaus in etwa $\Delta_{Vol} = 3,2$ m³ Porenwasser weniger innerhalb des Modells befinden als zu Beginn der Strömungssimulation, verringert sich das innerhalb des Modells befindliche Porenwasservolumen bedingt durch die Simulation des Bohrlochabteufens noch einmal um weitere

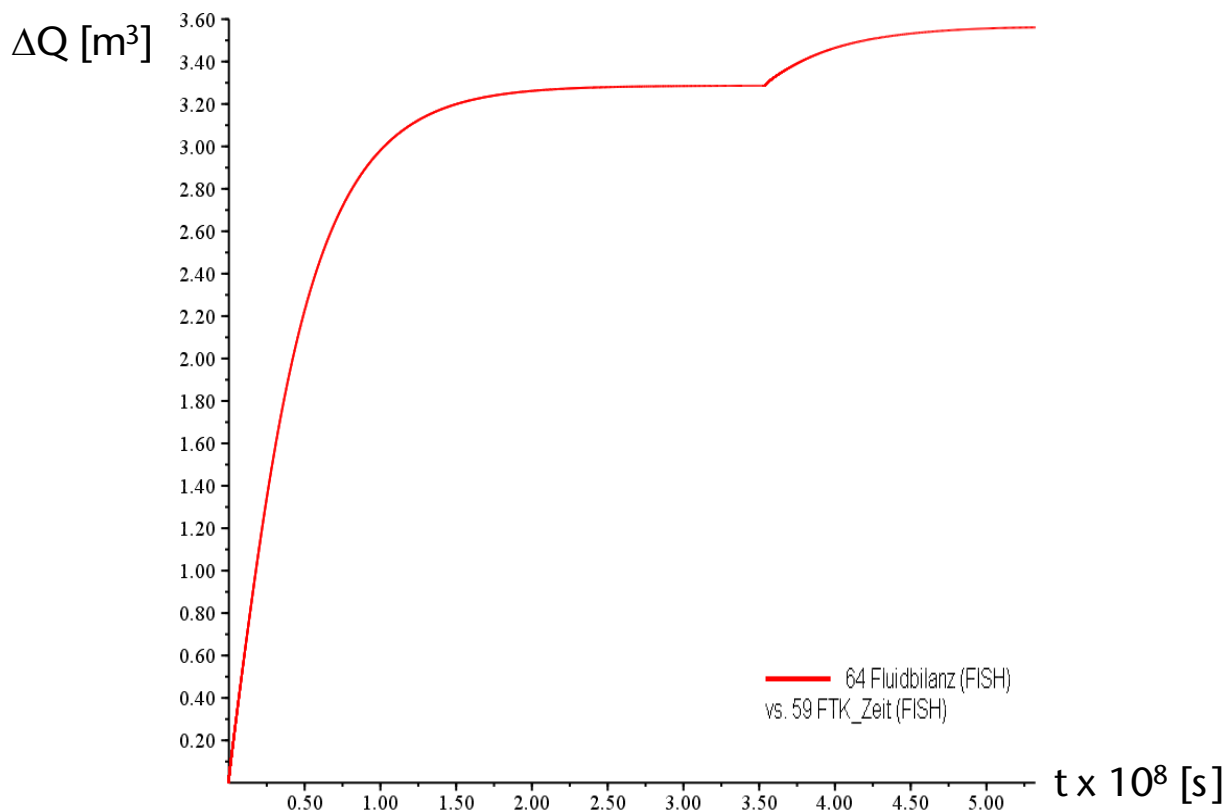


Bild 6.156: Fluidbilanz im stationären Zustand zum Zeitpunkt 4096+2048 Tage nach dem Ausbruch des Streckenabschnitts und 2048 Tage nach dem Abteufen des Bohrlochs für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell – hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation, berechnet mit dem FTK-Simulator.

$\Delta V_{\text{vol}} = 0,3 \text{ m}^3$. Der durch das Bohrlochabteufen bedingte Volumenanteil an der Gesamtfuidbilanz beträgt somit $\Delta V_{\text{vol}_{\text{BL}}} / \Delta V_{\text{vol}_{\text{ges}}} \approx 8,6 \%$.

(c4) Exemplarische Analyse eines Referenzquerschnitts

Bild 6.157 zeigt den im vorliegenden Abschnitt untersuchten Referenzquerschnitt in einer Tiefe von $t_{\text{BL}} = 5,6 \text{ m}$. Die in Bild 6.157 angegebene Koordinate $x = 7,6 \text{ m}$ bezieht sich auf das im Bohrloch-Streckenmodell verwendete Koordinatensystem und somit auf den Streckenmittelpunkt. Das insgesamt $l_{\text{BL}} = 6,0 \text{ m}$ lange Bohrloch erstreckt sich innerhalb des Bohrloch-Streckenmodells von der Koordinate $x = 2,0 \text{ m}$ am im Streckenstoß gelegenen Bohrlochmund bis zur Koordinate $x = 8,0 \text{ m}$ am Bohrlochtiefsten.

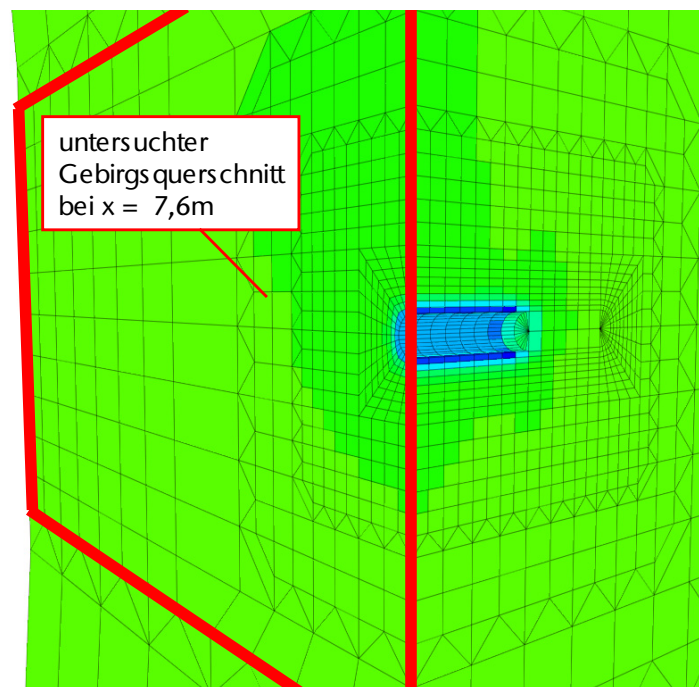


Bild 6.157: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – exemplarisch analysierter Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m mit Darstellung des bis zum Bohrlochtieftsten bei $x = 8,0$ m abgeteufte Bohrlochs

Die Serie von Flächenplots, die nachfolgend in Bild 6.158 bis Bild 6.165 betrachtet werden kann, zeigt zunächst die Entwicklung der maximalen Hauptspannungsverteilung in Abhängigkeit vom Stand des Bohrlochtieftsten während des Abteufens des Bohrlochs im bei $x = 7,6$ m gelegenen Referenzquerschnitt sowie innerhalb des jenseits von $x = 7,6$ m gelegenen Gebirges.

Das in der Realität kontinuierlich ablaufende Bohrlochabteufen wird im Rahmen der durchgeführten numerischen Simulationsarbeiten durch die nacheinander durchgeführten Ausbrüche von jeweils einer Elementreihe mit in Bohrlochlängsrichtung $d = 5$ cm dicken Zonen abgebildet. Nach dem Ausbruch der $d = 5$ cm starken Zonenreihe im Bereich des Bohrlochquerschnitts erfolgt jeweils zunächst die elastische Balancierung und im Anschluss daran eine hydraulisch-mechanisch gekoppelte Strömungssimulation für einen Simulationszeitraum von $\Delta t = 180$ Sekunden, bevor nachfolgend die Simulation des Ausbruchs der nächsten Zonenreihe erfolgt. In den ersten sechs Bildern der insgesamt acht Bilder umfassenden Bilderserie von Bild 6.158 bis Bild 6.165 sind die maximalen Hauptspannungsverteilungen, die sich im Anschluss an den jeweiligen Abschlag und die 180-sekündige Strömungsphase im Gebirge einstellen, für sechs unmittelbar aufeinander folgende Abschlüge dargestellt.



Im Flächenplot in Bild 6.158 ist zunächst die maximale Hauptspannungsverteilung im Referenzquerschnitt nach der Simulation des Bohrlochvortriebs bis zu einer Bohrlochteufe von $t_{BL} = 5,55$ m, was im Modell einer x-Koordinate von $x = 7,55$ m entspricht, dargestellt worden. Die im Flächenplot in Bild 6.158 zu betrachtende Hauptspannungsverteilung ist somit diejenige, die sich im Referenzquerschnitt zu dem Zeitpunkt eingestellt hat, als das Bohrlochtieftste während des Vortriebs noch einen Abstand von $\Delta x = 5$ cm zum Referenzquerschnitt gehabt hat. Der Flächenplot im darauf folgenden Bild 6.159 zeigt dementsprechend die maximale Hauptspannungsverteilung zu genau dem Zeitpunkt des Bohrlochabteufens, zu dem das Bohrlochtieftste den Referenzquerschnitt erreicht hat. In den vier nachfolgenden Bildern kann die maximale Hauptspannungsverteilung entsprechend zu den Simulationszeitpunkten betrachtet werden, an denen der Referenzquerschnitt bereits durchteuft worden ist und das Bohrlochtieftste sich in einem Abstand von $\Delta x = 5$ cm, $\Delta x = 10$ cm, $\Delta x = 15$ cm und $\Delta x = 20$ cm befindet. Bild 6.164 zeigt die maximale Hauptspannungsverteilung im Referenzquerschnitt und in dem dahinter liegenden Gebirge bei einer Position des Bohrlochtieftsten von $\Delta x = 30$ cm hinter dem Referenzquerschnitt. In Bild 6.165 ist abschließend die maximale Hauptspannungsverteilung zu betrachten, die sich unmittelbar zum Abschluss des Abteufens des $l_{BI} = 6$ m langen Bohrlochs bei einer Position des Bohrlochtieftsten von $x = 8,0$ m im Gebirge einstellt.

Im Flächenplot in Bild 6.158 kann betrachtet werden, wie aufgrund des Lastabtrags durch das vor dem Bohrlochtieftsten gelegene Gebirge im Referenzquerschnitt im Bereich des Bohrlochquerschnitts und in dem den Bohrlochquerschnitt unmittelbar umgebenden Gebirge bereits eine geringfügige Erhöhung der maximalen Hauptspannungen stattgefunden hat, noch bevor das Bohrlochtieftste im Zuge des Bohrlochabteufens den Referenzquerschnitt erreicht hat. Der farblichen Zuordnung der maximalen Hauptspannungen zu den Gebirgselementen entsprechend der zum Flächenplot gehörigen Zahlenwerteskala kann entnommen werden, dass im Bereich des Bohrlochquerschnitts und in dem den Bohrlochquerschnitt unmittelbar umgebenden Gebirge beim Stand des Bohrlochtieftsten bei $x = 7,55$ m maximale Hauptspannungen von $\sigma_{\max} \approx 8$ MPa erreicht werden, während ansonsten im Referenzquerschnitt maximale Hauptspannungen von $\sigma_{\max} \approx 7$ MPa vorherrschen. Weiter kann dem Flächenplot in Bild 6.158 entnommen werden, dass mit zunehmendem Abstand vom Referenzquerschnitt niedrigere maximale Hauptspannungen im Gebirge vorliegen (\rightarrow hellgrüne Färbung der Gebirgselemente im rechten Bereich des Flächenplots). Diese Beobachtung ist allerdings nicht dem

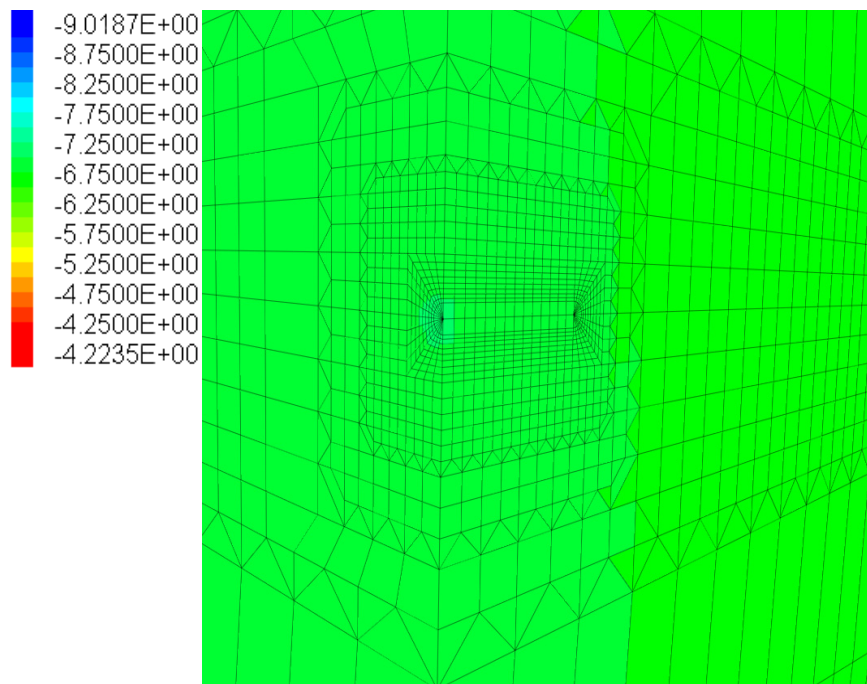


Bild 6.158: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Darstellung der größten Hauptspannungen im exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m während des Abteufens des Bohrlochs bei einer aktuellen Position des Bohrloch-tiefsten bei $x = 7,55$ m

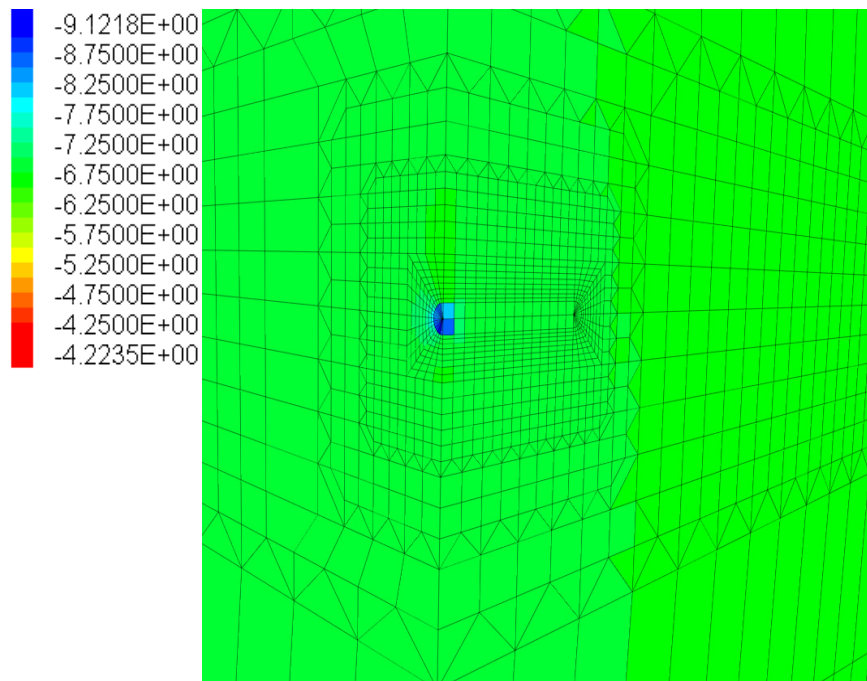


Bild 6.159: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Darstellung der größten Hauptspannungen im exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m während des Abteufens des Bohrlochs bei einer aktuellen Position des Bohrloch-tiefsten bei $x = 7,6$ m

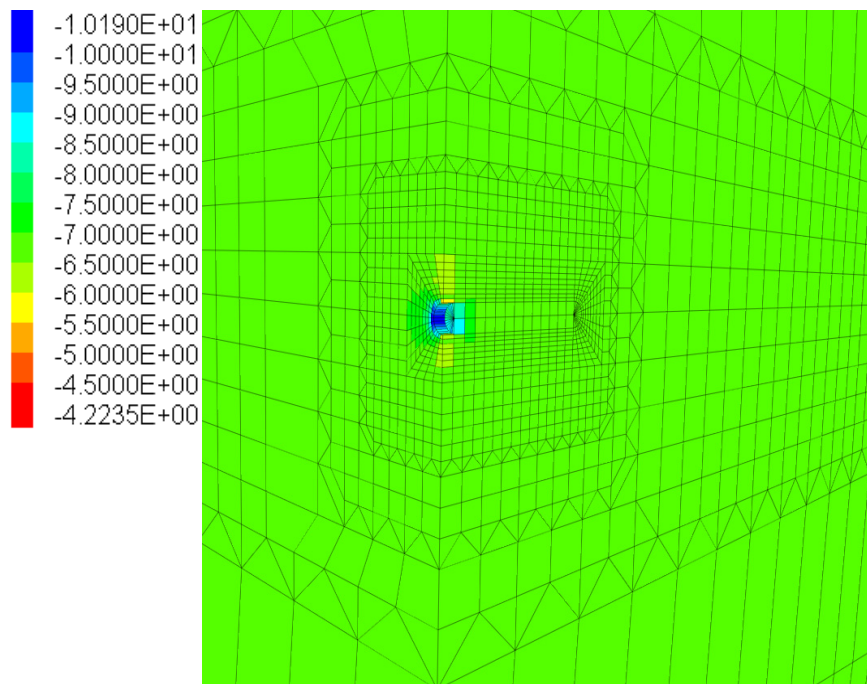


Bild 6.160: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Darstellung der größten Hauptspannungen im exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m während des Abteufens des Bohrlochs bei einer aktuellen Position des Bohrloch-tiefsten bei $x = 7,65$ m

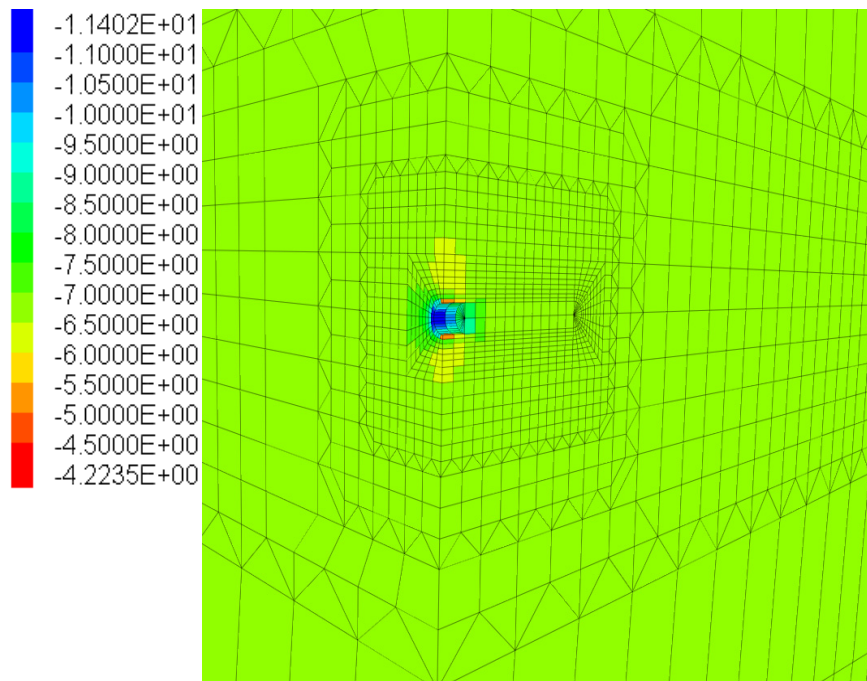


Bild 6.161: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Darstellung der größten Hauptspannungen im exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m während des Abteufens des Bohrlochs bei einer aktuellen Position des Bohrloch-tiefsten bei $x = 7,7$ m

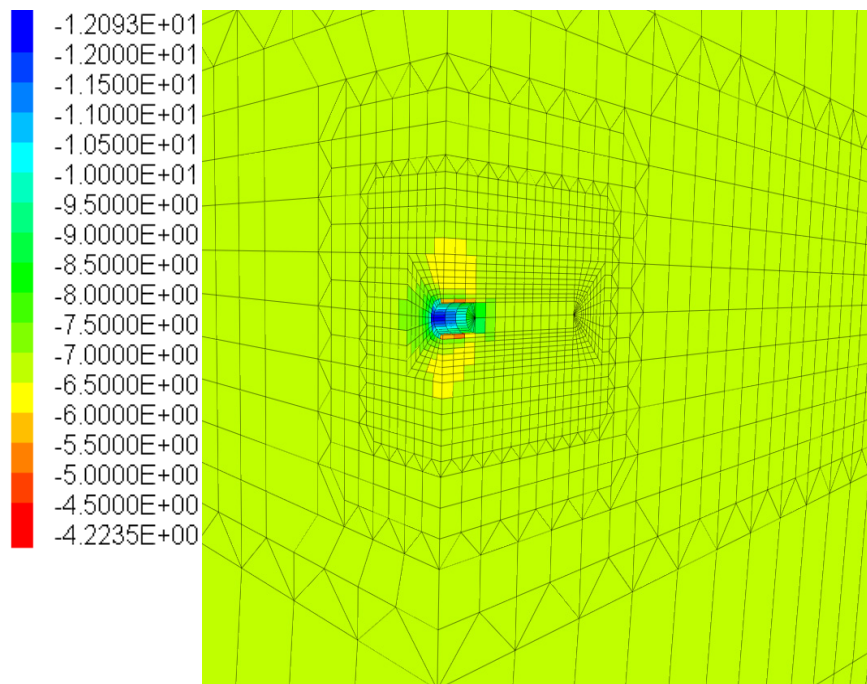


Bild 6.162: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Darstellung der größten Hauptspannungen im exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m während des Abteufens des Bohrlochs bei einer aktuellen Position des Bohrloch-tiefsten bei $x = 7,75$ m

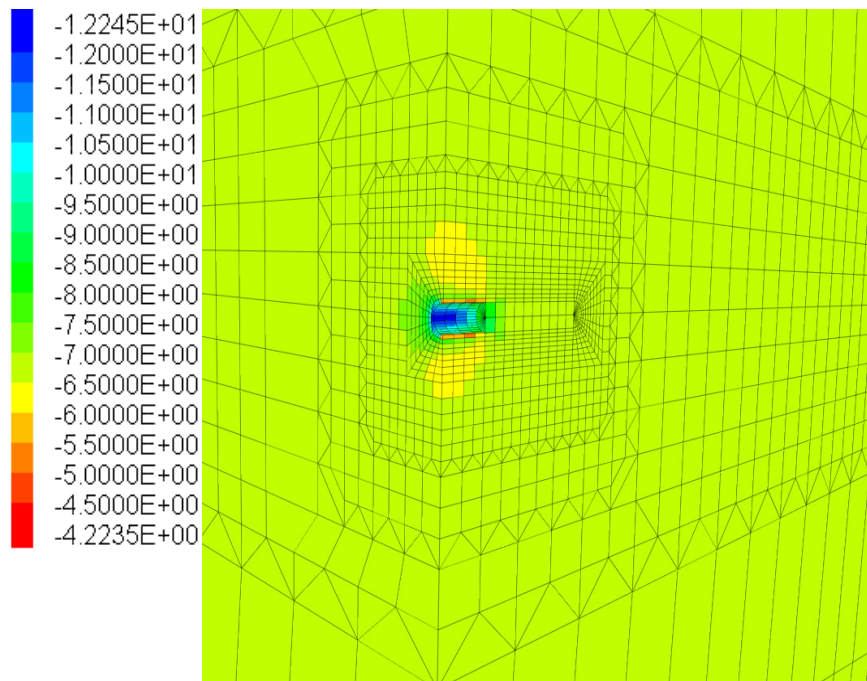


Bild 6.163: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Darstellung der größten Hauptspannungen im exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m während des Abteufens des Bohrlochs bei einer aktuellen Position des Bohrloch-tiefsten bei $x = 7,8$ m

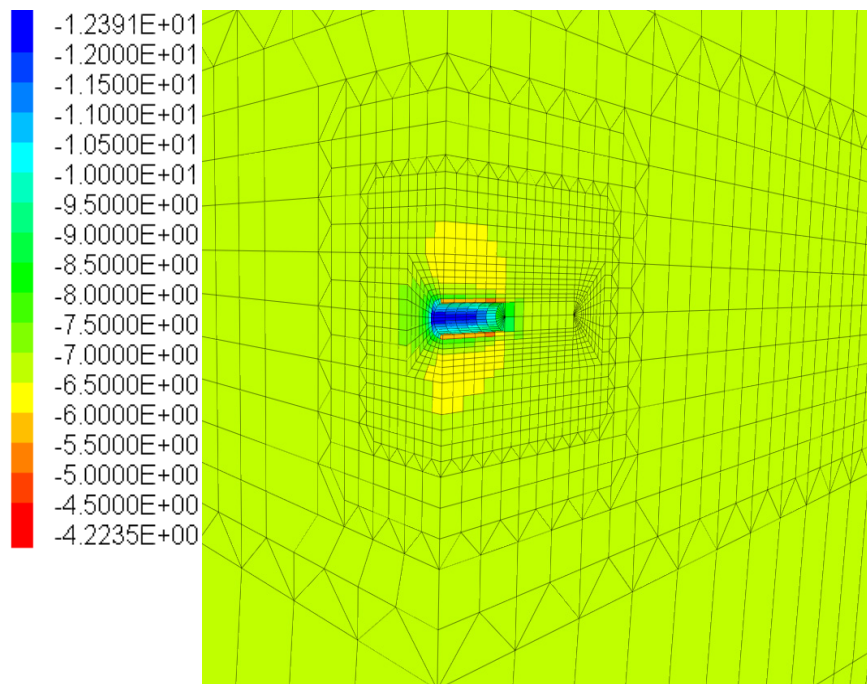


Bild 6.164: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Darstellung der größten Hauptspannungen im exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m während des Abteufens des Bohrlochs bei einer aktuellen Position des Bohrloch-tiefsten bei $x = 7,9$ m

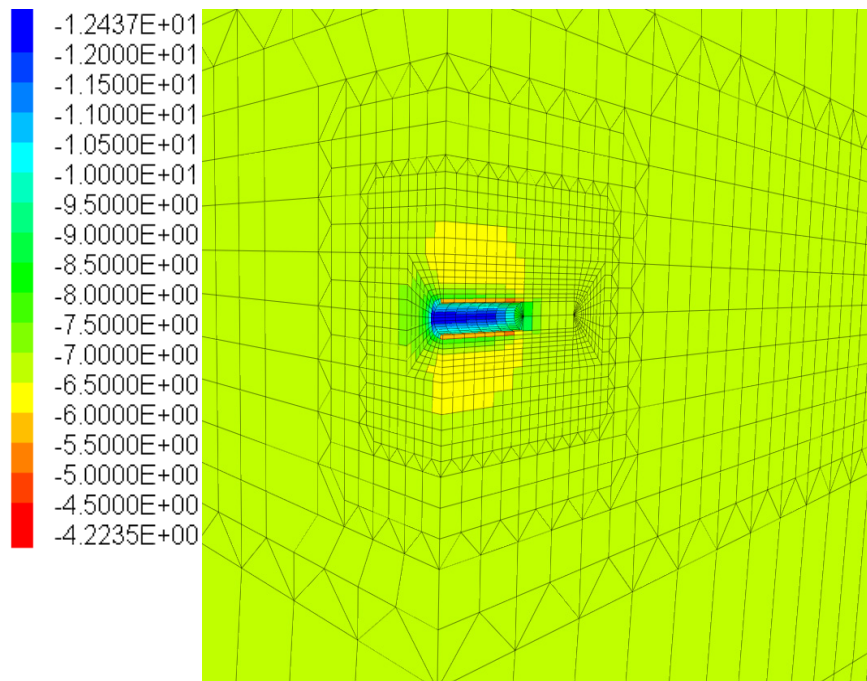


Bild 6.165: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Darstellung der größten Hauptspannungen im exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m während des Abteufens des Bohrlochs bei einer aktuellen Position des Bohrloch-tiefsten bei $x = 8,0$ m

Bohrlochvortrieb geschuldet, sondern der Tatsache, dass sich das modellierte Bohrloch innerhalb des mechanischen Nahfelds des Streckenabschnitts befindet.

In den nachfolgend dargestellten sieben Flächenplots in Bild 6.159 bis Bild 6.165 kann beobachtet werden, wie beim Annähern des Bohrlochtiefsten an den Referenzquerschnitt, beim Durchteufen des Referenzquerschnitts und im Anschluss daran während der Annäherung des Bohrlochtiefsten an seine endgültige Position bei $x = 8,0$ m innerhalb des Referenzquerschnitts die maximalen Hauptspannungen weiter anwachsen. Bei den maximalen Hauptspannungen handelt es sich für den Fall eines unausgebauten, kreisrunden Hohlraums um Tangentialspannungen. Wie Bild 6.159 bis Bild 6.165 entnommen werden kann, steigen die Tangentialspannungen insbesondere im Bereich des Bohrlochstoßes während des Durchteufens des Referenzquerschnitts an. Im First- und Sohlbereich des Bohrlochs ist dagegen ein leichtes Abfallen der Tangentialspannungen zu verzeichnen. Die der Bilderserie von Bild 6.159 bis Bild 6.165 zu entnehmende beschriebene Entwicklung der Tangentialspannungsverteilung um das Bohrloch herum ist der durch das Abteufen des Streckenabschnitts hervorgerufenen, im betrachteten Gebirgsbereich leicht anisotropen Hauptspannungsverteilung geschuldet. Für den Fall eines isotropen Primärspannungsfeldes ohne Streckeneinfluss wäre eine gleichmäßige Verteilung der Tangentialspannungen in dem das Bohrloch umgebenden Gebirge zu erwarten gewesen. In der ungleichmäßigen Verteilung der Tangentialspannungen in den unmittelbar an der Bohrlochkontur gelegenen Gebirgszonen zeigt sich somit die durch die Überlagerung der Sekundärspannungsfelder bedingte gegenseitige Beeinflussung des Tragverhaltens von Bohrloch und Strecke.

Auffällig bei der Betrachtung von Bild 6.165 ist, dass die maximalen Tangentialspannungen im Stoßbereich des Bohrlochs, in dem hinter dem Referenzquerschnitt gelegenen Gebirgsbereich bei der räumlichen Annäherung an das Bohrlochtiefste abnehmen. Anhand der Abnahme der maximalen Tangentialspannungen bei der Annäherung an das Bohrlochtiefste verdeutlicht sich die vorangehend bereits erwähnte Entlastung des Gebirges im Bereich der Hohlraumkontur durch die mittragende Wirkung des Gebirges vor dem Bohrlochtiefsten (3D-Tragwirkung).

Anhand der in Bild 6.158 bis Bild 6.165 dargestellten Serie von Flächenplots sind zwei entscheidende Aspekte, die die Überlegenheit des kombinierten Bohrloch-Streckenmodells gegenüber einem zweidimensionalen Bohrlochmodell in Bezug auf die realitätsnahe Abbildung des Tragverhaltens von kombinierten untertägigen Tragsystemen verdeutlichen, dargestellt

worden. Bei den beiden Aspekten handelt es sich zum einen um die Möglichkeit, die Überlagerung der Sekundärspannungsfelder von Bohrloch und benachbartem Streckenabschnitt zu berücksichtigen und zum anderen um die Möglichkeit, während der Vortriebssimulation die mittragende Wirkung des vor dem Bohrlochtiefsten gelegenen Gebirgsbereichs numerisch zu berücksichtigen.

Nachfolgend wird der betrachtete Referenzquerschnitt zur genaueren Überprüfung der qualitativen Kreditabilität der mit dem FTK-Simulator für das kombinierte dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell ermittelten Simulationsergebnisse detaillierter untersucht. Hierzu wird die Entwicklung ausgewählter Zustandsgrößen entlang eines $l_s = 3,0$ m langen Horizontalschnitts von der Bohrlochlängsachse bis zum hinteren Modellrand während des Bohrlochabteufens untersucht. Die Lage des Horizontalschnitts im betrachteten Referenzquerschnitt kann Bild 6.166 entnommen werden.

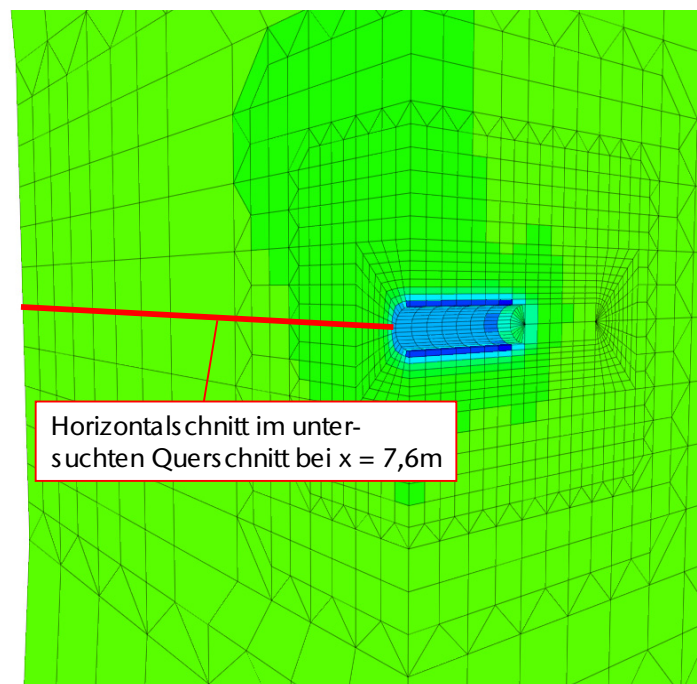


Bild 6.166: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Horizontalschnitt im exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m mit Darstellung des bis zum Bohrlochtiefsten bei $x = 8,0$ m abgeteufte Bohrlochs

In den nachfolgend in Bild 6.167 bis Bild 6.170 dargestellten Diagrammen werden die Entwicklungen der größten und kleinsten Hauptspannungen, des Porenwasserdrucks sowie der Matrixausnutzungsgrade in dem in Bild 6.166 dargestellten Horizontalschnitt während und nach der Simulation des Bohrlochabteufens in Abhängigkeit sowohl von der Position des



Bohrlochtiefsten sowie auch in Abhängigkeit von der Zeit dargestellt. Betrachtet werden im Rahmen der Auswertung der Zustandsgrößen zwölf Simulationszeitpunkte, die alle innerhalb des Simulationszeitraums, in dem das Abteufen des letzten Bohrlochmeters simuliert worden ist, liegen. Darüber hinaus wird ein innerhalb des nach dem Abteufen des Bohrlochs erreichten stationären Zustands gelegener Simulationszeitpunkt ebenfalls in die Ergebnisanalyse mit einbezogen.

Zur Erleichterung der Interpretation der in den Diagrammen in Bild 6.167 bis Bild 6.170 vorgenommenen Ergebnisdarstellungen sind in Tabelle 6.10 die zur näheren Betrachtung ausgewählten Simulationszeitpunkte inklusive der zugehörigen Bezeichnung in den Legenden der nachfolgend dargestellten Diagramme sowie inklusive der zu den jeweiligen Simulationszeitpunkten erreichten Position des Bohrlochtiefsten dargestellt.

Bezeichnung Simulationszeitpunkt	simulierte Zeit seit Beginn des Bohrlochabteufens	x-Position des Bohrlochtiefsten [m]
0	0 s	2,00
1	18180 s	7,05
4	18720 s	7,20
8	19440 s	7,40
10	19800 s	7,50
11	19980 s	7,55
12	20160 s	7,60
13	20340 s	7,65
14	20520 s	7,70
15	20700 s	7,75
16	20880 s	7,80
18	21240 s	7,90
20	21600 s	8,00
stat.	2048 Tage	8,00

Tabelle 6.10: Übersicht über die im Rahmen der Analyse der dreidimensionalen Bohrlochvortriebssimulation mit dem FTK-Simulator untersuchten Simulationszeitpunkte. Spalte 1: Bezeichnung des Simulationszeitpunkts in den nachfolgend dargestellten Diagrammen; Spalte 2: Simulierter Zeitraum seit Beginn des Bohrlochabteufens; Spalte 3: Position des Bohrlochtiefsten zum betrachteten Simulationszeitpunkt

Das Diagramm in Bild 6.167 stellt die zeitabhängige Entwicklung der minimalen und der maximalen Hauptspannungen im Referenzquerschnitt dar.

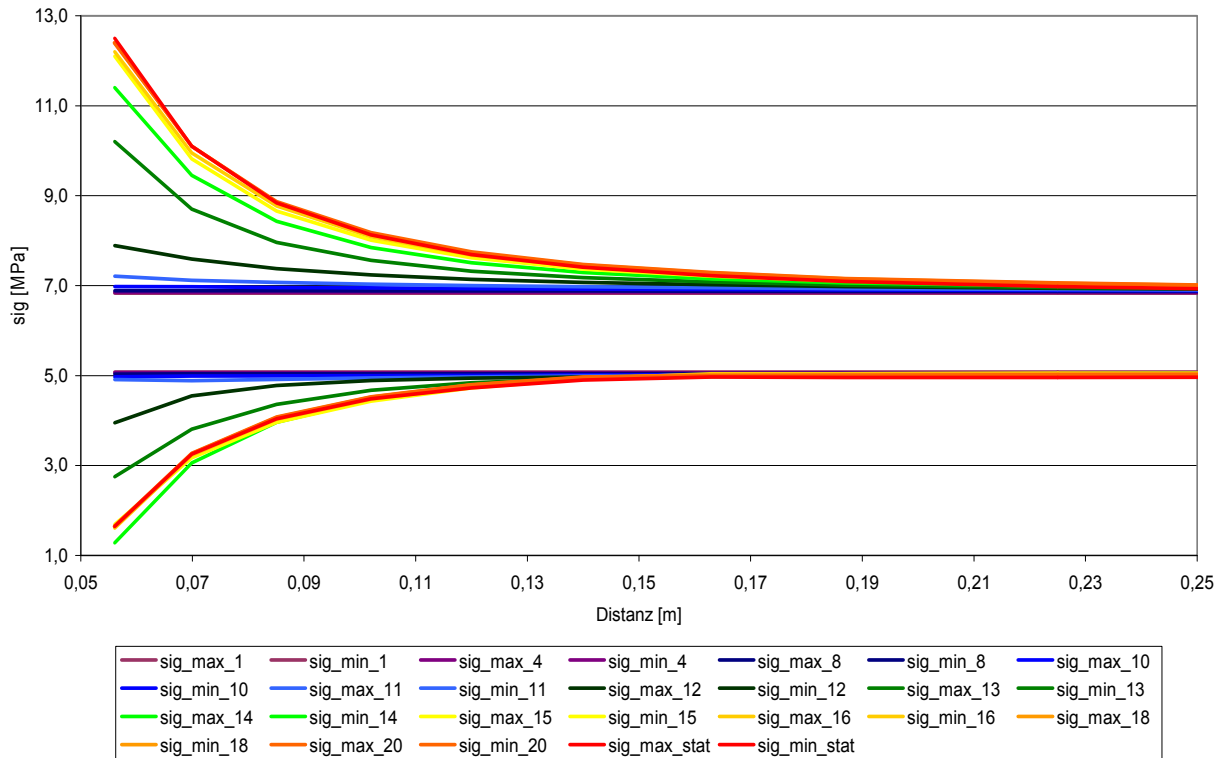


Bild 6.167: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Hauptspannungsverteilung im Horizontalschnitt im exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6 \text{ m}$ in Abhängigkeit von der Position des Bohrlochtiefsten während des Abteufens des Bohrlochs. Darstellung des Horizontalschnitts von $y = 0,05 \text{ m}$ bis $y = 0,25 \text{ m}$

Die Untersuchung ausgesuchter relevanter Zustandsgrößen erfolgt für den Referenzquerschnitt entlang eines in y -Richtung $l_s = 3,0 \text{ m}$ langen Horizontalschnitts, der sich von der vorderen bis zur hinteren Stirnfläche des Modells erstreckt. Da die Beeinflussung des Gebirges bezüglich der Hauptspannungsverteilung sich jedoch auf einen Gebirgsbereich mit einer Ausdehnung in der Größenordnung von in etwa fünf Bohrlochradien um das Bohrloch herum beschränkt, ist aus Gründen der besseren Anschaulichkeit zur Darstellung eine Beschränkung des Horizontalschnitts auf eine Länge von $l_{s2} = 0,25 \text{ m}$ erfolgt.

Bild 6.167 kann entnommen werden, dass zu Beginn des Bohrlochabteufens die maximale Hauptspannung im Referenzquerschnitt $\sigma_{\max} \approx 7 \text{ MPa}$ beträgt und die minimale Hauptspannung einen Zahlenwert von $\sigma_{\min} \approx 5 \text{ MPa}$ aufweist. Eine erste bei der Begutachtung von Bild 6.167 optisch wahrnehmbare Veränderung der Hauptspannungsverteilung entlang des Referenz-

renzquerschnitts tritt, wie die Betrachtung von Bild 6.158 bereits hat erahnen lassen, bei einer Position des Bohrlochtiefsten von $x = 7,55$ m auf. Zum entsprechenden Simulationszeitpunkt steigt die maximale Hauptspannung vor dem Bohrlochtiefsten um $\Delta\sigma_{\max} \approx 0,2$ MPa an, während für die minimale Hauptspannung ein Absinken von $\Delta\sigma_{\min} \approx 0,1$ MPa zu verzeichnen ist. Deutlichere Veränderungen bezüglich der Hauptspannungsverteilung ergeben sich beim Erreichen der betrachteten Referenzteufe durch das Bohrlochtiefste. Zu dem Simulationszeitpunkt, zu dem sich das Bohrlochtiefste während der Simulation des Abteufens genau in der Teufe des Referenzquerschnitts bei $x = 7,6$ m befindet, sinken die minimalen Hauptspannungen auf $\sigma_{\min} \approx 4,0$ MPa ab, während die maximalen Hauptspannungen auf einen Zahlenwert von $\sigma_{\max} \approx 8,0$ MPa anwachsen.

Die signifikantesten, während eines Vortriebssimulationsabschnitts eintretenden Veränderungen der Hauptspannungen ereignen sich unmittelbar nach der Simulation des Durchteufens des Referenzquerschnitts. Bei einer Position des Bohrlochtiefsten von $x = 7,65$ m erreichen die maximalen Hauptspannungen im Referenzquerschnitt an der Bohrlochkontur einen Zahlenwert von $\sigma_{\max} \approx 10,2$ MPa, was bedeutet, dass die maximalen Hauptspannungen an der Bohrlochkontur um mehr als $\Delta\sigma_{\max} \approx 2,0$ MPa anwachsen, während das Bohrloch um $\Delta x = 5$ cm über den Referenzquerschnitt hinaus geteuft wird. Im gleichen Zeitraum fallen die minimalen Hauptspannungen im Stoß des Bohrlochs um mehr als $\Delta\sigma_{\min} \approx 1,0$ MPa auf einen Zahlenwert von $\sigma_{\min} \approx 2,8$ MPa ab. Für die Position des Bohrlochtiefsten bei $x = 7,7$ m ergeben sich nochmals deutliche Veränderungen sowohl für die maximalen wie auch für die minimalen Hauptspannungen an der Kontur des Bohrlochs sowie im konturnahen Gebirge. Wie der Darstellung der Hauptspannungen im Horizontalschnitt in Bild 6.167 entnommen werden kann, sind zum entsprechenden Simulationszeitpunkt die maximalen Hauptspannungen im unmittelbar am Bohrlochstoß gelegenen Gebirge auf einen Zahlenwert von $\sigma_{\max} \approx 11,4$ MPa angestiegen, während die minimalen Hauptspannungen auf einen Zahlenwert von $\sigma_{\min} \approx 1,2$ MPa abgesunken sind.

An dieser Stelle wird darauf hingewiesen, dass die Spannungen mit dem FTK-Simulator in den Zonenschwerpunkten berechnet werden, und dass somit die Zahlenwerte für die Spannungen aufgrund der in der Nähe des Bohrlochs zwar deutlich verfeinerten, aber im Verhältnis zum geringen Bohrlochdurchmesser wiederum doch eher gröberen Diskretisierung nicht direkt an der Bohrlochkontur erhalten worden sind, sondern erst in einem gewissen Abstand hinter der Bohrlochkontur. Mittels Extrapolation der Zahlenwertegraphen in Bild 6.167 auf

die Bohrlochkontur ($y = 0,05 \text{ m}$) kann davon ausgegangen werden, dass an dieser Position die minimalen Hauptspannungen der dort aufgebrachten mechanischen Randbedingung von $\sigma_r \approx 0,11 \text{ MPa}$ (atmosphärischer Luftdruck) entsprechen, während die maximalen Hauptspannungen an der Bohrlochkontur durch die maximalen Zahlenwerte aus Bild 6.167 noch in mehr oder minder starkem Maße unterschätzt werden. Gleichwohl kann in den Zahlenwertegraphen der Einfluss des in x-Richtung fortschreitenden Bohrlochvortriebs auf das Spannungsfeld im Bohrlochnahfeld des Gebirges in Form einer sich schrittweise in y-Richtung, d.h. radial ausbreitenden gesteigerten Gebirgsbeanspruchung beobachtet werden.

Bezüglich der berechneten minimalen Hauptspannungen tritt für die nachfolgenden Simulationszeiträume eine minimale Erhöhung auf einen Zahlenwert von $\sigma_{\min} \approx 1,6 \text{ MPa}$ ein, der im Anschluss bis zum Erreichen des stationären Strömungszustands nahezu unverändert bestehen bleibt. Bezüglich der maximalen Hauptspannungen ergibt sich im Zuge des Simulationsschritts des Abteufens von $x = 7,7 \text{ m}$ auf $x = 7,75 \text{ m}$ eine weitere Erhöhung auf einen Zahlenwert von $\sigma_{\max} \approx 12,2 \text{ MPa}$. In allen weiteren darauf folgenden Schritten vollzieht sich bis zum Erreichen des stationären Strömungszustands nur noch ein geringfügiger Anstieg der maximalen Hauptspannungen auf einen zum Ende der Berechnungen erreichten Zahlenwert von $\sigma_{\max} \approx 12,6 \text{ MPa}$ im Stoß des Bohrlochs.

Insgesamt betrachtet zeigt die Darstellung der zeit- und vortriebsabhängigen Entwicklung der Hauptspannungsverteilungen, welche Gebirgsbeanspruchungen im Rahmen einer dreidimensionalen Vortriebssimulation vor, während und nach dem Durchteufen eines betrachteten Referenzquerschnitts vorliegen. Aus den Bild 6.167 zu entnehmenden, zwischen den einzelnen Simulationsabschnitten eintretenden Veränderungen bezüglich der Hauptspannungsverteilungen heraus ist abzuleiten, welche signifikante Bedeutung der Durchführung von dreidimensionalen Abteufens- bzw. Vortriebssimulationen bei der detailgetreuen und realitätsnahen Abbildung des Deformations- und Tragverhaltens des Gebirges in der Umgebung eines untertägigen Hohlraums zukommt.

Bild 6.168 und Bild 6.169 zeigen die Entwicklung des Porenwasserdrucks entlang des untersuchten Horizontalschnitts im Referenzquerschnitt vor, während und nach dem Durchteufen des Referenzquerschnitts im Rahmen der Simulation des Bohrlochabteufens. In Bild 6.168 ist die zeitabhängige Porenwasserdruckentwicklung entlang des gesamten $l_s = 3,0 \text{ m}$ langen Horizontalschnitts zu betrachten, während es sich bei dem Diagramm in Bild 6.169 um eine Detaildarstellung der näheren Umgebung des Bohrlochs mit einer Begrenzung der y-Achse auf

einen Zahlenwert von $y = 1,0$ m handelt. Die dargestellten Zahlenwerte der Porenwasserdrücke sind jeweils in den Schwerpunkten der Gebirgszonen berechnet worden.

Die Betrachtung des roten Zahlenwertegraphen, der die Porenwasserdruckverteilung im Horizontalschnitt nach dem Erreichen des stationären Strömungszustands repräsentiert, zeigt, dass der Porenwasserdruck sich bedingt durch das Abteufen des Bohrlochs am hinteren Modellrand in $\Delta y \approx 2,95$ m Entfernung von der Bohrlochkontur um $\Delta PW \approx 0,14$ MPa von $PW \approx 0,7$ MPa auf $PW \approx 0,56$ MPa verringert hat. Im Vorfeld der Simulation des Bohrlochabteufens ist der Porenwasserdruck von ursprünglich $PW \approx 2,0$ MPa durch den Ausbruch des Streckenabschnitts entlang des gesamten Horizontalschnitts auf einen Zahlenwert von $PW \approx 0,7$ MPa abgesenkt worden.

Die zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdruckverteilung entlang des Horizontalschnitts in Abhängigkeit von der Zeit sowie von der Position des Bohrlochtiefsten während

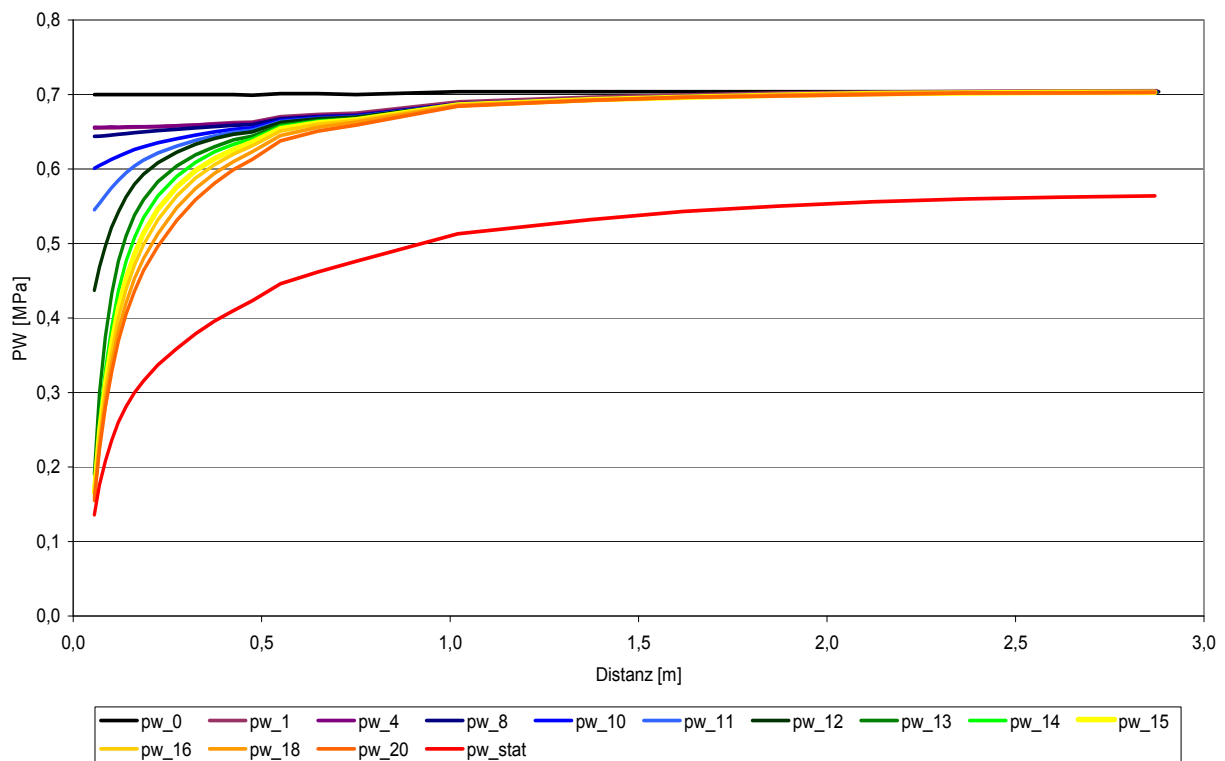


Bild 6.168: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Porenwasserdruckverteilung im Horizontalschnitt in dem exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6$ m in Abhängigkeit von der Position des Bohrlochtiefsten während des Abteufens des Bohrlochs. Darstellung des Horizontalschnitts von $y = 0,0$ m bis $y = 3,0$ m

des Bohrlochabteufens in der näheren Umgebung des Bohrlochs kann in Bild 6.169 betrachtet werden.

Die Verläufe der Zahlenwertegraphen in Bild 6.169 verdeutlichen, dass ein deutlich zu identifizierender Einfluss des Bohrlochabteufens auf die Porenwasserdruckverteilung entlang des Horizontalschnitts im Referenzquerschnitt sehr viel eher festgestellt werden kann als der vorangehend diskutierte Einfluss des Bohrlochabteufens auf die Hauptspannungsverteilung im Referenzquerschnitt. Bereits bei einer Position des Bohrlochtiefsten bei $x = 7,05 \text{ m}$, also $\Delta x = 0,55 \text{ m}$ vor dem Erreichen des Referenzquerschnitts, ist eine Reduzierung des Porenwasserdrucks im Gebirgsbereich vor dem Bohrlochtiefsten um $\Delta PW \approx 0,04 \text{ MPa}$ von ursprünglich $PW \approx 0,7 \text{ MPa}$ auf $PW \approx 0,66 \text{ MPa}$ zu verzeichnen. Bei dem in Bild 6.169 als Ausgangsporenwasserdruck vor Beginn des Bohrlochabteufens betrachteten Porenwasserdruck von $PW \approx 0,7 \text{ MPa}$ handelt es sich nicht um den primären Porenwasserdruck im Gebirge, son-

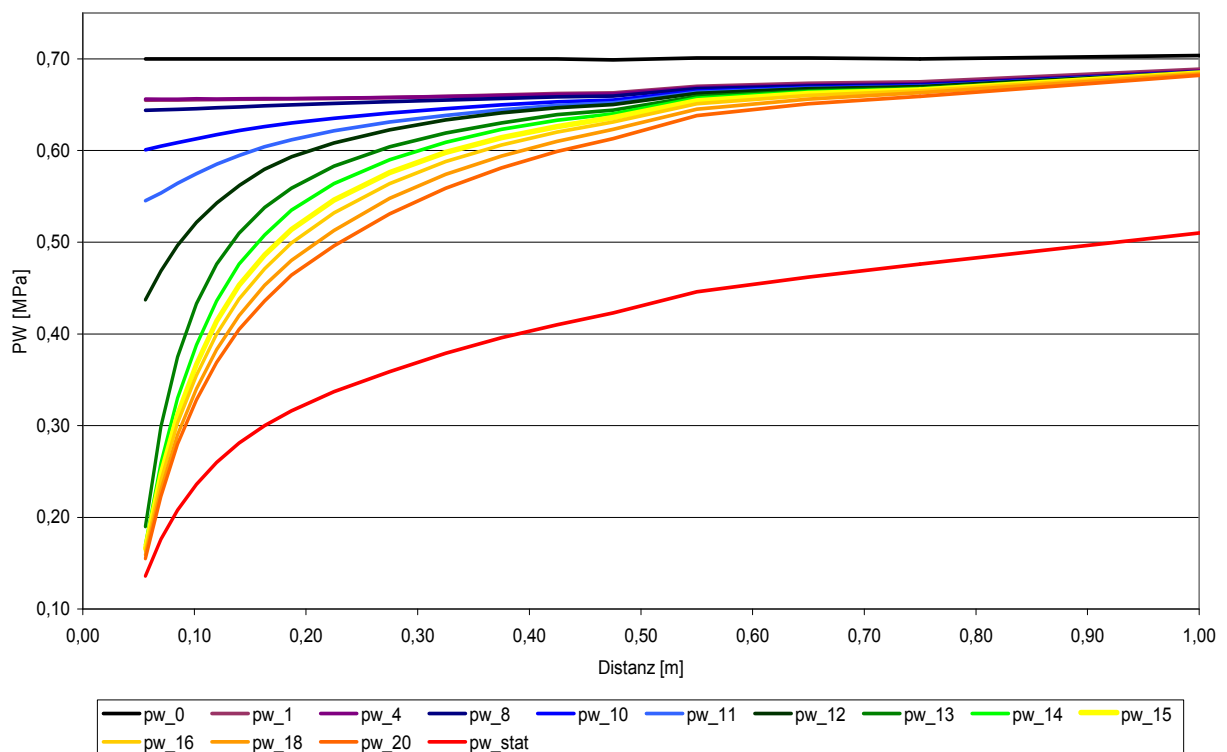


Bild 6.169: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Porenwasserdruckverteilung im Horizontalschnitt in dem exemplarisch analysierten Gebirgsquerschnitt bei $x = 7,6 \text{ m}$ in Abhängigkeit von der Position des Bohrlochtiefsten während des Abteufens des Bohrlochs. Darstellung des Horizontalschnitts von $y = 0,0 \text{ m}$ bis $y = 1,0 \text{ m}$



dem um den bereits durch die im Anschluss an den Streckenausbruch eintretenden Strömungsprozesse abgesenkten Porenwasserdruck. Der ursprünglich vor dem Streckenausbruch im Gebirge vorherrschende primäre Porenwasserdruck beträgt $PW = 2,0$ MPa.

Mit fortschreitender Annäherung des Bohrlochtieftsten an den Referenzquerschnitt im Rahmen der Simulation des Bohrlochabteufens vergrößert sich die Porenwasserdruckabnahme im Referenzquerschnitt pro ausgebrochener Elementreihe. Beim Erreichen des Referenzquerschnitts durch das Bohrlochtieftste beträgt der Porenwasserdruck an der Konturgrenze des Bohrlochs noch $PW \approx 0,44$ MPa. Da nach dem Durchteufen des Referenzquerschnitts der Porenwasserdruck unmittelbar an der Kontur des Bohrlochs aus numerischen Gründen auf den knapp oberhalb des atmosphärischen Luftdrucks gelegenen Zahlenwert $PW \approx 0,11$ MPa fixiert wird, fällt der im Diagramm in Bild 6.169 zu betrachtende, im Zonenschwerpunkt der ersten unmittelbar neben dem Bohrlochstoß gelegenen Gebirgszone berechnete Porenwasserdruck zwischen dem 12. und dem 13. Simulationszeitpunkt um in etwa $\Delta PW \approx 0,26$ MPa auf einen Zahlenwert von $PW \approx 0,18$ MPa ab. Aufgrund der Fixierung des Porenwasserdrucks entlang der Bohrlochkontur auf den Zahlenwert von $PW \approx 0,11$ MPa ändert sich im weiteren Verlauf der Berechnung der Porenwasserdruck im Schwerpunkt der ersten Zone neben dem Bohrlochstoß nur noch geringfügig.

Ein etwas stärkerer Porenwasserdruckabbau ist bereits während der noch andauernden Simulation des Bohrlochvortriebs in dem in etwa $0,05 \text{ m} \leq \Delta y \leq 0,5 \text{ m}$ von der Bohrlochkontur entfernten Gebirgsbereich zu verzeichnen. Anhand des bereits wenige Minuten nach dem Durchteufen des Referenzquerschnitts auch in einigen Bohrlochdurchmessern Abstand zur Bohrlochkontur relativ deutlich bei der optischen Begutachtung von Bild 6.169 zu erkennenen Porenwasserdruckabbaus entlang des Horizontalschnitts zeigt sich die Auswirkung der mit einem Zahlenwert von $k_f = 10^{-10}$ m/s für die durchgeführten numerischen Berechnungen relativ hoch angesetzten Gebirgspermeabilität. Eine Gebirgspermeabilität mit einem Zahlenwert von $k_f = 10^{-10}$ m/s entspricht eher der nahe eines untertägigen Hohlraums innerhalb der EDZ im URL Mont Terri vorherrschenden Gebirgspermeabilität als der Permeabilität des Gebirges in den von Hohlraumauffahrungen unbeeinflussten Gebirgsbereichen. Die um ca. zwei Größenordnungen gegenüber der Permeabilität des ungestörten Gebirges erhöhte Gebirgspermeabilität ist für die hier vorgestellten numerischen Berechnungen mit dem Schwerpunkt der Analyse des Bohrloch(trag)verhaltens im Streckennahfeld vereinfachend für das gesamte modellierte Gebirge angesetzt worden.

Mit Ausnahme des schwarzen Zahlenwertegraphen, der wie bereits erwähnt die Porenwasserdruckverteilung entlang des Horizontalschnitts im Referenzquerschnitt vor Beginn des Bohrlochabteufens beschreibt, repräsentieren die weiteren in Bild 6.169 zu betrachtenden Zahlenwertegraphen die Porenwasserdruckverteilungen zu jeweils gerade einmal $\Delta t = 180$ s zeitlich voneinander getrennt liegenden Simulationszeitpunkten. Dementsprechend weisen die Zahlenwertegraphen insbesondere in den bohrlochferneren Modellbereichen sich nur sehr geringfügig voneinander unterscheidende Verläufe auf. Die einzige Ausnahme bezüglich des Verlaufs in den bohrlochferneren Gebirgsbereichen stellt der rote Zahlenwertegraph dar. Er repräsentiert die Porenwasserdruckverteilung im stationären Strömungszustand zu dem Simulationszeitpunkt $t = 2048$ Tage nach dem Ende des Bohrlochabteufens.

Abschließend kann in Bild 6.170 die zeit- und vortriebsabhängige Entwicklung der aus den zuvor diskutierten Zustandsgrößen resultierenden Matrixausnutzungsgrade entlang des Horizontalschnitts im Referenzquerschnitt betrachtet werden.

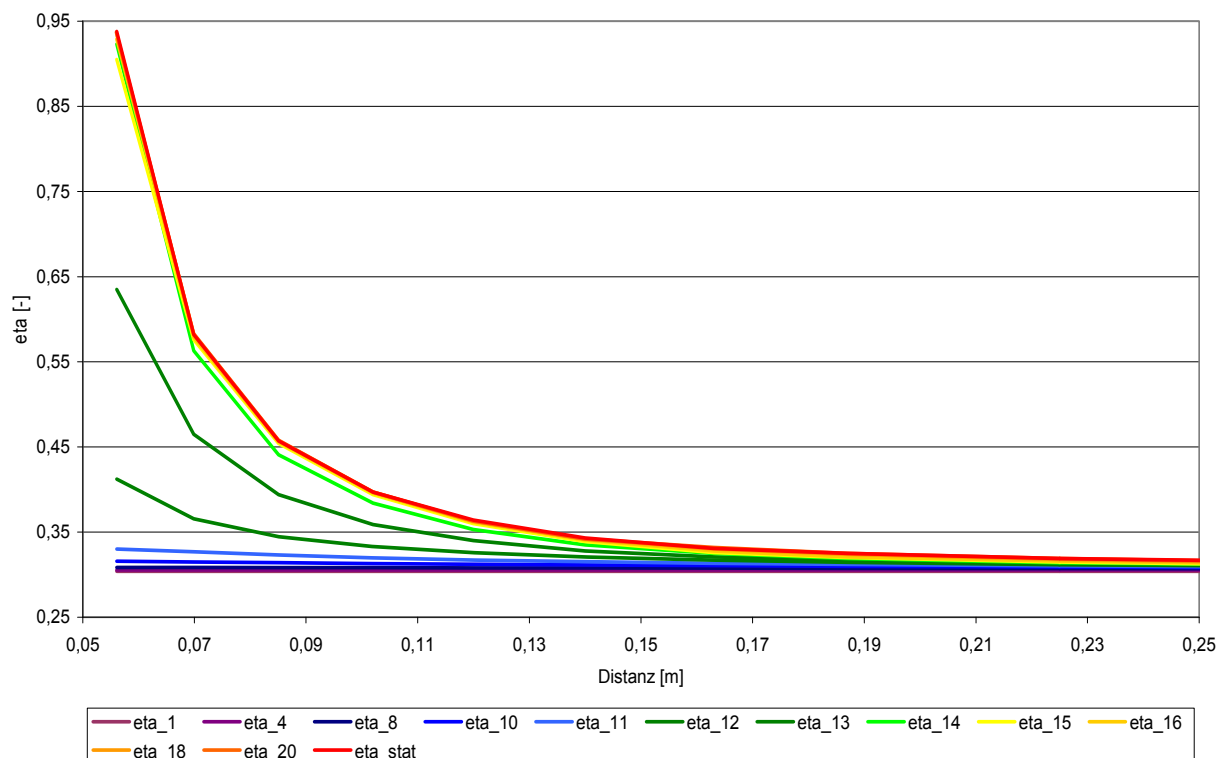


Bild 6.170: Dreidimensionale Simulation des Bohrlochvortriebs – Matrixausnutzungsgrade im Horizontalschnitt in dem exemplarisch analysierten Referenzquerschnitt bei $x = 7,6$ m in Abhängigkeit von der Position des Bohrlochtieftsten während des Abteufens des Bohrlochs. Darstellung des Horizontalschnitts von $y = 0,05$ m bis $y = 0,25$ m



Wie bereits im Rahmen der Diskussion der zeitabhängigen Entwicklung der Hauptspannungsverteilung erfolgt auch für die Diskussion der Entwicklung der Matrixausnutzungsgrade eine räumliche Beschränkung auf den konturnahen Gebirgsbereich mit einer Begrenzung des in Bild 6.170 dargestellten Zahlenwertebereichs auf $y = 0,25$ m. Die Begrenzung der Betrachtung der Matrixausnutzungsgrade auf den konturnahen Bereich im Rahmen der Ergebnisanalyse kann erfolgen, da in einer Entfernung von $\Delta y = 0,25$ m zur Bohrlochlängsachse bereits keine signifikanten Unterschiede zwischen den zu den unterschiedlichen Simulationszeitpunkten berechneten Matrixausnutzungsgraden mehr identifizierbar sind.

Da, wie bereits in Abschnitt 6.4.3.5(d4) beschrieben, die maximalen Hauptspannungen von allen drei relevanten gebirgsmechanischen Zustandsgrößen den größten Einfluss auf die berechneten Matrixausnutzungsgrade für das Gebirge in der Umgebung eines unausgebauten kreisförmigen Hohlraums ausüben, erscheint es logisch, dass die in Bild 6.170 zu betrachtende zeit- und vortriebsabhängige Entwicklung der Matrixausnutzungsgrade sehr stark der in Bild 6.168 zu betrachtenden zeit- und vortriebsabhängigen Entwicklung der maximalen Hauptspannungen ähnelt.

Zunächst betragen die entlang des Horizontalschnitts im Referenzquerschnitt berechneten Matrixausnutzungsgrade bei einer Position des Bohrlochtiefsten von $x = 7,05$ m durchgängig $\eta_M \approx 0,3$. Bei der Annäherung des Bohrlochtiefsten an den Referenzquerschnitt im Zuge der Simulation des Bohrlochabteufens steigen die Matrixausnutzungsgrade zunächst nur geringfügig an, bis das Bohrlochtiefste eine Position von $\Delta x = 0,1$ m beziehungsweise $\Delta x = 0,05$ m entfernt vom Referenzquerschnitt erreicht. Beim Erreichen des Referenzquerschnitts im Zuge der Simulation des Abteufens steigen die Matrixausnutzungsgrade in der Konturzone des Bohrlochs auf einen Zahlenwert von $\eta_M \approx 0,42$ an. Für den nachfolgenden Simulationszeitpunkt, zu dem das Bohrlochtiefste während des Bohrlochabteufens den Referenzquerschnitt bereits um $\Delta x = 0,05$ m überschritten hat, erreichen die Matrixausnutzungsgrade im Konturbereich des Bohrlochs einen Zahlenwert von $\eta_M \approx 0,64$. Anhand des Vergleichs des ermittelten Zahlenwertes von $\eta_M \approx 0,64$ mit den zu den späteren Simulationszeitpunkten ermittelten Matrixausnutzungsgraden, die im Referenzquerschnitt im Bereich des Bohrlochstoßes alle innerhalb eines Zahlenwertebereichs von $0,9 \leq \eta_M \leq 0,94$ liegen, zeigt sich die entlastende Wirkung auf das Gebirge entlang der Bohrlochkontur, die sich während des Abteufens durch den Lastabtrag über das vor dem Bohrlochtiefsten liegende Gebirge ergibt. Beim weiteren Abteufen des Bohrlochs entfernt sich die Ortsbrust vom betrachteten Referenzquerschnitt und



die mittragende Wirkung des Gebirges vor dem Bohrlochtiefsten entfällt, sodass die berechneten Matrixausnutzungsgrade im Konturbereich des Bohrlochs für die späteren Simulationszeitpunkte stark ansteigen.

(d) Analysevariationen zum Einfluss einer schichtungsgefügebedingten Materialanisotropie auf das Tragverhalten von Strecke und Bohrloch

(d1) Grundsätzliche Anmerkungen

Im Rahmen der Anfertigung des vorliegenden Berichts sind alle numerischen Simulationen unter Verwendung des Stoffmodells *Hooke* mit Abbildung eines isotropen linear-elastischen Materialverhaltens durchgeführt worden. Zur Auswertung der Simulationsergebnisse bezüglich der vorliegenden Matrixausnutzungsgrade ist in den vorangehenden Abschnitten bereits Bezug auf das Mohr-Coulomb'sche Bruchkriterium genommen worden. Im vorliegenden Abschnitt wird die Ergebnisanalyse bezüglich der im Gebirge unter Bezug auf das Mohr-Coulomb'sche Bruchkriterium vorherrschenden Ausnutzungsgrade für den Fall eines in einer Tongesteinsformation grundsätzlich vorhandenen Schichtflächengefüges erweitert. Zur Berechnung der Ausnutzungsgrade des Gebirges in den Schichtflächen erfolgt entsprechend der betrachteten Schichtflächenorientierung eine Transformation der im Modell vorherrschenden Koordinatenspannungen in auf die Schichtflächen des Gebirges einwirkende Normalspannungen und Schubspannungen nach *Wittke (1984)*. Die der Berechnung der Ausnutzungsgrade zugrunde liegenden Spannungen sind die im Rahmen der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Analyse generierten effektiven Gebirgsspannungen σ_{eff} .

Nachfolgend werden exemplarisch drei unterschiedliche, in einer Tonsteinlagerstätte möglicherweise vorherrschende Orientierungen eines Schichtflächengefüges untersucht. Als Ausgangssituation für die Analyse der Gebirgsmatrixausnutzungsgrade und der Ausnutzungsgrade des Gebirges in den Schichtflächen wird jeweils der Gebirgszustand bezüglich der Spannungsverteilung und bezüglich der Porenwasserdruckverteilung herangezogen, der bei der hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Analyse unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodells und unter der Annahme eines isotropen sowie linear-elastischen Materialverhaltens nach dem Erreichen des stationären Strömungszustands im Anschluss an das Bohrlochabteufen ermittelt worden ist.



In *Lux & Seeska (2010)* werden ausführliche Überlegungen zu den Auswirkungen einer schichtungsgefügebedingten Materialanisotropie auf das Tragverhalten der Einlagerungskammern und Betriebsstrecken eines zukünftig zu errichtenden Endlagers für radioaktive Abfälle dargelegt. Entsprechend der in *Lux & Seeska (2010)* dargelegten Überlegungen scheint es ratsam, als potenzielle Endlagerwirtsgesteine insbesondere söhlig gelagerte Tongesteinsformationen in Betracht zu ziehen. In Anlehnung an die Ausführungen von *Lux & Seeska (2010)* wird nachfolgend in Abschnitt 6.4.3.8(d2) das Tragverhalten des kombinierten untertägigen Tragwerks *Bohrloch-Strecke* für den als gebirgsmechanisch günstig identifizierten Fall eines horizontal gelagerten Schichtflächengefüges analysiert, bevor nachfolgend in den Abschnitten 6.4.3.8(d3) und 6.4.3.8(d4) in Anlehnung an die im URL Mont Terri vorherrschende gebirgsmechanische Situation das Gebirgstragverhalten in der Umgebung des kombinierten untertägigen Tragwerks *Bohrloch-Strecke* für den Fall eines gegenüber der Horizontalen um $\alpha = 45^\circ$ geneigt anstehenden Schichtflächengefüges untersucht wird. Zur Untersuchung des Tragverhaltens für den Fall eines geneigt anstehenden Schichtflächengefüges wird differenziert zwischen dem Fall eines im Streichen der Schichtflächen geteuften Bohrlochs mit einer orthogonal zum Streichen der Schichtflächen verlaufenden Streckenlängsachse in Abschnitt 6.4.3.8(d3) sowie dem Fall eines orthogonal zum Streichen der Schichtflächen geteuften Bohrlochs mit dementsprechend im Streichen der Schichtflächen verlaufender Streckenlängsachse in Abschnitt 6.4.3.8(d4).

Zur Veranschaulichung des Einflusses der Orientierung des Schichtungsgefüges auf das Tragverhalten des kombinierten untertägigen Tragwerks bestehend aus Bohrloch und Streckenabschnitt werden in den nachfolgenden Abschnitten 6.4.3.8(d2-d4) zu jeder der durchgeführten Analysen drei Flächenplots dargestellt. In den vorgestellten Flächenplots wird das Gebirge in der Umgebung des Tragsystems *Bohrloch-Strecke* in vier unterschiedliche Kategorien unterteilt. Die zwei entscheidenden Faktoren für die Unterteilung in die vier unterschiedlichen Kategorien sind dabei die in den einzelnen Gebirgszonen vorherrschenden Matrix- und Schichtflächenausnutzungsgrade.

Wird in einer der Gebirgszonen in der im Anschluss an die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnung unter Verwendung des Stoffmodells *Hooke* zur Abbildung von linear-elastischem Materialverhalten durchgeführten Analyse weder in der Gebirgsmatrix noch in den Schichtflächen des Gebirges unter Bezugnahme auf das Mohr-Coulomb'sche Bruchkriterium ein Ausnutzungsgrad mit einem Zahlenwert von $\eta > 1,0$ berechnet, so wird diese Gebirgszone



in den nachfolgenden Flächenplots in grün dargestellt und somit als Gebirgszone gekennzeichnet, in der auf Basis der durchgeführten Analyse weder ein Versagen des Gebirges in den Schichtflächen noch ein Versagen der Gesteinsmatrix zu besorgen ist. Gebirgsbereiche, in denen die durchgeführte Analyse einen Ausnutzungsgrad des Gebirges in den Schichtflächen von $\eta_J > 1,0$ ergeben hat und in denen somit ein Versagen des Gebirges in den Schichtflächen zu erwarten ist, werden nachfolgend in gelb dargestellt. Gebirgszonen, in denen ein Ausnutzungsgrad der Gesteinsmatrix von $\eta_M > 1,0$ vorherrscht, werden in den nachfolgenden Flächenplots orangefarben dargestellt und solche Gebirgselemente, in denen sowohl mit einem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen sowie darüber hinaus auch noch mit einem Versagen der Gesteinsmatrix zu rechnen ist, da unter Bezugnahme auf das Mohr-Coulomb'sche Bruchkriterium für beide im Rahmen der Analyse betrachteten Ausnutzungsgrade ein Zahlenwert von $\eta > 1,0$ ermittelt worden ist, wird die Farbe rot zugewiesen.

Ausdrücklich anzumerken ist, dass hier keine Tragwerksauslegung erfolgt und daher Sicherheitsmargen in die Auswertung nicht eingearbeitet sind.

Für alle drei durchgeführten Variationsanalysen wird zunächst ein Flächenplot mit dem Gesamtsystem *Bohrloch-Strecke* vorgestellt, bevor im Anschluss daran eine detailliertere Darstellung des Bohrlochs, des Bohrlochmundes und des bohrlochnahen Gebirges in einem Flächenplot erfolgt und abschließend in einem Detailausschnitt die Situation in der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochtiefsten aufgezeigt wird.

Bezüglich der Analyse des Matrixtragverhaltens ist der in den nachfolgenden Abschnitten erfolgenden Ergebnisdiskussion vorwegzunehmen, dass im Rahmen der hier durchgeführten nachträglichen Auswertung von Berechnungsergebnissen, die unter Verwendung eines Stoffmodells zur Abbildung eines isotropen linear-elastischen Materialverhaltens generiert worden sind, ausschließlich ein bestehender, unveränderlicher Zustand innerhalb des Gebirges analysiert wird. Da im Rahmen einer derartigen Ergebnisauswertung mittels eines Nachlaufprogramms keine Spannungsumlagerungen aus überbelasteten Gebirgsbereichen heraus in die mechanisch weniger stark belasteten Zonen benachbarter Gebirgsbereiche hinein simuliert werden kann, ergeben sich bezüglich des Tragverhaltens der Gesteinsmatrix unabhängig von der bezüglich der Schichtflächenorientierung durchgeführten Variationsanalyse stets identische Simulationsergebnisse. Daher wird im Rahmen der nachfolgend durchgeführten Ergebnisanalyse das Hauptaugenmerk auch auf die Unterschiede, die sich zwischen den einzelnen Variationsanalysen bezüglich des Schichtflächentragverhaltens ergeben, gelegt.

Die den nachfolgend vorgestellten Berechnungsergebnissen zu Grunde liegenden theoretischen Hintergründe zur rechnerischen Ermittlung der Schichtflächenausnutzungsgrade in einem mit anisotropen Festigkeitseigenschaften ausgebildeten Gebirgselement in Abhängigkeit von der Orientierung des Schichtflächengefüges werden in *Wittke (1984)* ausführlich beschrieben. Eine ausführliche praxisbezogene Analyse der Auswirkungen des Schichtflächentragverhaltens auf das Streckentragverhalten in Abhängigkeit von der Schichtflächenorientierung, der Streckenorientierung sowie in Abhängigkeit von dem in der betrachteten Gebirgsformation vorherrschenden Primärspannungszustand ist darüber hinaus in *Lux & Seeska (2010)* erfolgt.

(d2) Horizontales Schichtflächengefüge

Die Serie von Flächenplots in Bild 6.171 bis Bild 6.173 zeigt zunächst die Einteilung des Gebirges in die vier vorangehend beschriebenen Kategorien mit dem jeweiligen Gebirgstragverhalten für den Fall eines söhlig gelagerten Schichtflächengefüges. In Bild 6.171 ist das vollständige kombinierte Tragsystem *Bohrloch-Strecke* dargestellt, während in Bild 6.172 ein Ausschnitt aus Bild 6.171 mit einer vergrößerten Darstellung des Bohrlochmunds sowie des streckennahen Teufenbereichs zu ersehen ist. Das zu erwartende Gebirgstragverhalten in der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochtiefsten kann in Bild 6.173 betrachtet werden.

Ein Versagen der Gesteinsmatrix ist, wie Bild 6.171 entnommen werden kann, entlang der Streckenkontur im gesamten Firstbereich sowie im gesamten viertelkreisförmigen Segment im Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle zu erwarten. Bei den Bereichen mit zu erwartendem Versagen der Gesteinsmatrix handelt es sich somit um die Gebirgsbereiche, für die im Rahmen der durchgeführten numerischen Berechnungen besonders große maximale Hauptspannungen ermittelt worden sind. Die Betrachtung von Bild 6.172 zeigt, dass auch in einem großen Teufenbereich des Bohrlochs entlang der Bohrlochkontur mit einem Versagen der Gesteinsmatrix zu rechnen ist. Aus der orangefarbenen sowie aus der roten Kennzeichnung der entsprechenden Gebirgsbereiche im Flächenplot in Bild 6.172 ist zu schlussfolgern, dass sich die Gebirgsbereiche in der Umgebung des Bohrlochs, in denen ein Versagen der Gesteinsmatrix zu erwarten ist, im Stoßbereich des Bohrlochs befinden.

Insgesamt ist im Flächenplot in Bild 6.172 der Teufenbereich des Bohrlochs unmittelbar beginnend am Bohrlochmund bis in eine Teufe von $t_{BL} \approx 5,0$ m dargestellt. Versagen der Ge-

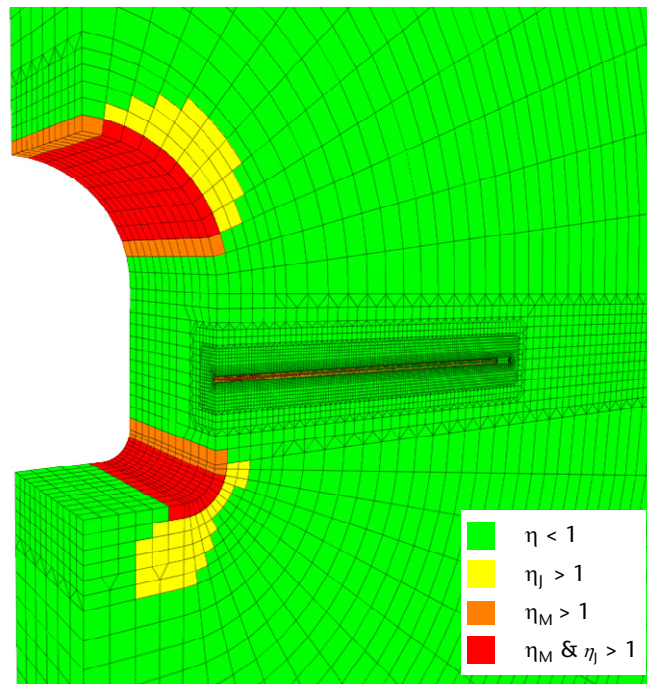


Bild 6.171: Darstellung von Gebirgsbereichen mit einem Ausnutzungsgrad von η_M & $\eta_J < 1$ (grün), $\eta_M < 1$ & $\eta_J > 1$ (gelb), $\eta_M > 1$ & $\eta_J < 1$ (orangefarben) und η_M & $\eta_J > 1$ (rot) im Flächenplot für den Fall eines horizontal verlaufenden Schichtflächengefüges – Gesamttragsystem Strecke und Bohrloch

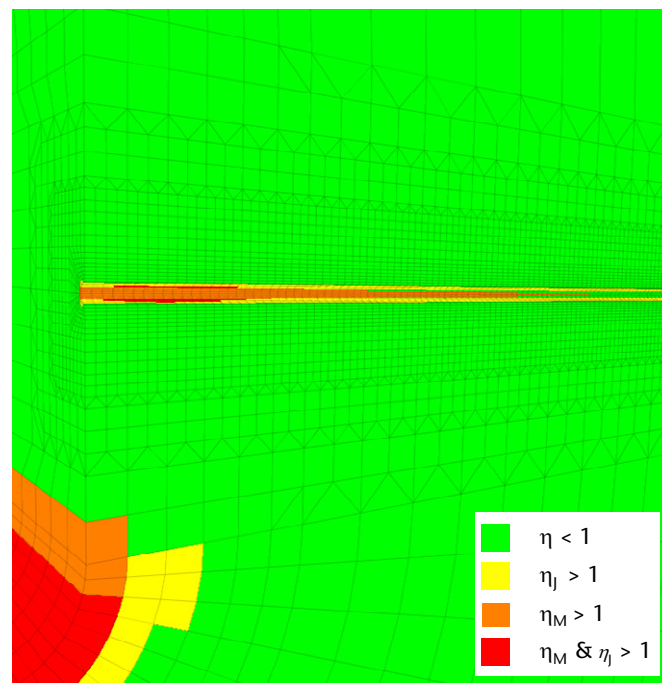


Bild 6.172: Darstellung von Gebirgsbereichen mit einem Ausnutzungsgrad von η_M & $\eta_J < 1$ (grün), $\eta_M < 1$ & $\eta_J > 1$ (gelb), $\eta_M > 1$ & $\eta_J < 1$ (orangefarben) und η_M & $\eta_J > 1$ (rot) im Flächenplot für den Fall eines horizontal verlaufenden Schichtflächengefüges – Bohrloch

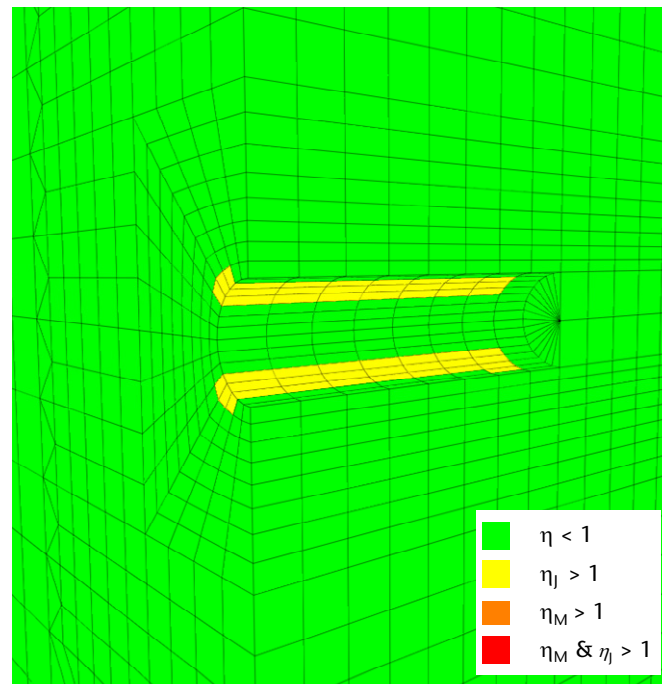


Bild 6.173: Darstellung von Gebirgsbereichen mit einem Ausnutzungsgrad von η_M & $\eta_J < 1$ (grün), $\eta_M < 1$ & $\eta_J > 1$ (gelb), $\eta_M > 1$ & $\eta_J < 1$ (orangefarben) und η_M & $\eta_J > 1$ (rot) im Flächenplot für den Fall eines horizontal verlaufenden Schichtflächengefüges – Bohrlochtiefstes

steinsmatrix ist gemäß der durchgeführten Analyse im Stoßbereich der Bohrlochkontur unmittelbar beginnend am Bohrlochmund und von dort aus weit bis in das Bohrloch hineinreichend zu erwarten. Die größten Bereiche mit zu erwartendem Versagen der Gesteinsmatrix entlang der Bohrlochkontur ergeben sich für den Teufenbereich von $0,1 \text{ m} \leq t_{BL} \leq 0,8 \text{ m}$. In diesem Gebirgsbereich liegen aufgrund der Ausbildung eines Tragrings im Gebirge infolge der Auf-fahrung der Strecke besonders große maximale Hauptspannungen vor. Die näher in Richtung des Bohrlochmundes gelegenen Gebirgsbereiche liegen dementsprechend in einem durch den geraden Verlauf des Bohrlochstoßes bedingten Druckschatten des Streckenabschnitts. Im Anschluss an den bis in eine Teufe von $t_{BL} \approx 0,8 \text{ m}$ reichenden Teufenbereich mit verstärkt zu erwartendem Versagen der Gesteinsmatrix folgt ein $l \approx 3,0 \text{ m}$ langer Teufenbereich bis in eine Teufe von $t_{BL} \approx 3,8 \text{ m}$, in dem die Bohrlochkonturbereiche mit zu erwartendem Versagen der Gesteinsmatrix sich kontinuierlich immer weiter bis auf den unmittelbaren Bohrlochstoßbereich reduzieren, bevor schließlich im tiefer als $t_{BL} \approx 3,8 \text{ m}$ in das Gebirge hineinreichenden Teufenbereich keine Gebirgszonen mit zu erwartendem Versagen der Gesteinsmatrix mehr zu identifizieren sind. Anhand der Verteilung der Bohrlochkonturbereiche mit zu erwartendem Versagen der Gesteinsmatrix zeigt sich der geomechanische Einfluss des Streckennahfeldes

auf das Tragverhalten des Bohrlochs. Dementsprechend ist auch, wie bereits die Betrachtung von Bild 6.172 erwarten lässt, in dem in Bild 6.173 dargestellten Flächenplot mit der Darstellung des Bohrlochtiefsten und des dem Bohrlochtiefsten unmittelbar vorgelagerten Gebirgsbereichs kein Bohrlochkonturbereich mit zu erwartendem Versagen der Gesteinsmatrix zu identifizieren.

Bezüglich des Versagens des Gebirges in den Schichtflächen ist Bild 6.171 zu entnehmen, dass entlang der Streckenkontur im Bereich des Firstgewölbes im Übergangsbereich zwischen Stoß und Sohle und unterhalb der Streckensohle eine Schädigung des Gebirges in den Schichtflächen zu erwarten ist. Zur Berechnung der Ausnutzungsgrade sind die in Abschnitt 6.4.3.3 in Tabelle 6.5 aufgeführten Parameter zur Bruchfestigkeit des Gebirges herangezogen worden. Die Ausnutzungsgrade des Gebirges in den Schichtflächen überschreiten in den Gebirgselementen den Zahlenwert von $\eta_I > 1,0$, in denen die innerhalb des Gebirgstragringes, der sich im Zuge der Spannungsumlagerungen um die Streckenkontur herum ausgebildet hat, vorherrschenden maximalen Hauptspannungen (Tangentialspannungen) schräg auf das horizontal gelagerte Schichtflächengefüge einwirken.

Besonders anfällig für das Auftreten von Gebirgsversagen in den Schichtflächen ist das Gebirge in solchen Bereichen, in denen die maximalen Hauptspannungen in einem Winkel von $\beta = 45^\circ - \varphi_I/2$ auf das Schichtflächengefüge einwirken, wobei φ_I den inneren Reibungswinkel des Gebirges in den Schichtflächen beschreibt. Kein Schichtflächenversagen ist hingegen in den Gebirgsbereichen zu erwarten, in denen die maximalen Hauptspannungen senkrecht oder parallel zum Schichtflächengefüge verlaufen (siehe dazu auch *Lux & Seeska, 2010*).

Im kreisrund geformten Firstbereich des Streckenabschnitts entsprechen die maximalen Hauptspannungen nahezu den Tangentialspannungen, woraus eine sehr systematische Anordnung der Zonen mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen entlang der Kontur des Firstgewölbes resultiert. Kein Schichtflächenversagen ist demnach ausschließlich im Firstbereich der Strecke, in dem die Tangentialspannungen des Firstgewölbes parallel zum Schichtungsgefüge verlaufen sowie im Übergangsbereich zum Stoßbereich, in dem die Tangentialspannungen senkrecht auf das horizontal gelagerte Schichtflächengefüge einwirken, zu erwarten. In den zwischen First und Stoß gelegenen Streckenkonturbereichen, in denen die Tangentialspannungen schräg auf das Schichtflächengefüge einwirken, ist dagegen gemäß der Darstellung in Bild 6.171 durchgängig ein zu erwartendes Schichtflächenversagen im Bereich des Firstgewölbes ermittelt worden. Am weitesten in das Gebirge hinein erstreckt sich der



Bereich mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen in dem Bereich der Streckenkontur, in dem die Tangentialspannungen des Firstgewölbes unter $\beta \approx 45^\circ$ geneigt oder noch etwas flacher gegenüber dem Schichtflächengefüge verlaufen.

Im Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle und im Konturbereich unterhalb der Streckensohle ist eine Systematik bezüglich der Anordnung der Gebirgszonen mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen schwieriger zu erkennen als im Bereich des Firstgewölbes. Bedingt durch den mit $r = 0,5$ m gegenüber dem $r = 2,0$ m messenden Firstgewölberadius deutlich kleineren Radius des kreisrund ausgeformten Übergangsbereichs zwischen Streckenstoß und Streckensohle, erreichen die im Rahmen der numerischen Simulation ermittelten Tangentialspannungen im Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle eine höhere Konzentration entlang der Streckenkontur als im Bereich des Firstgewölbes. Daher erstrecken sich im mittleren Bereich des Übergangsradius zwischen Streckenstoß und Streckensohle die Zonen mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen auch nur zwei Gebirgszonen tief in das die Strecke umgebende Gebirge hinein. Die in der gewählten Ergebnisdarstellung in Bild 6.171 nicht zu erkennenden Zahlenwerte des Ausnutzungsgrades des Gebirges in den Schichtflächen liegen für die Gebirgszonen im Bereich des Übergangsradius zwischen Streckenstoß und Streckensohle allerdings deutlich über den für die im Firstgewölbebereich angeordneten Gebirgszonen ermittelten Zahlenwerte der Schichtflächenausnutzungsgrade. Bedingt durch den weiteren Verlauf des sich unterhalb der Streckensohle einhergehend mit einer Spannungskonzentrationsabnahme aufweitenden Gebirgstragringes erstreckt sich der Bereich mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen unterhalb der Sohle des Streckenabschnitts in etwa so tief in das Gebirge hinein wie es auch im Bereich des Firstgewölbes der Fall ist. Weiter in Richtung der am Modellrand gelegenen Streckenmitte verlaufen die größten Hauptspannungen unterhalb der Streckensohle tendenziell schichtungsparell, sodass unterhalb des mittleren Bereichs der Streckensohle kein Versagen des Gebirges in den Schichtflächen zu erwarten ist.

Bei der Betrachtung von Bild 6.172 ist zu erkennen, dass sich die gleiche Systematik der Anordnung von Gebirgsbereichen mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen, wie sie für das kreisrund geformte Firstgewölbe der Strecke zu identifizieren gewesen ist, auch bezüglich des im Bereich der Bohrlochkontur zu erwartenden Versagens des Gebirges in den Schichtflächen abzeichnet. Weiter ist Bild 6.172 zu entnehmen, dass die räumliche Ausdehnung des zu erwartenden Versagens des Gebirges in den Schichtflächen entlang der

Bohrlochkontur, wie es bereits auch schon bezüglich des Matrixversagen in den vorangehenden Ausführungen festgestellt worden ist, mit zunehmender Entfernung von der Streckenkontur abnimmt. Allerdings endet der Teufenbereich mit dem zu erwartenden Versagen des Gebirges in den Schichtflächen nicht wie der Gebirgsbereich mit dem zu erwartenden Versagen der Gesteinsmatrix in einer Teufe von $t_{BL} \approx 3,8$ m, sondern er erstreckt sich aufgrund der gegenüber der Tragfähigkeit der Gesteinsmatrix geringeren Tragfähigkeit des Gebirges in den Schichtflächen bis hin zum Bohrlochtieftsten wie aus dem Flächenplot in Bild 6.173 ersehen werden kann.

Deutlicher als der Betrachtung von Bild 6.172 ist der Betrachtung von Bild 6.173 zu entnehmen, wie die Bereiche mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen entlang der Bohrlochkontur dort auftreten, wo die um das Bohrloch herum verlaufenden Tangentialspannungen in etwa in einem Winkel von $\beta = 45^\circ - \varphi_j/2$ auf das horizontal gelagerte Schichtflächengefüge einwirken. Die entlastende Wirkung des Gebirges vor der Ortsbrust auf das unmittelbar an der Bohrlochkontur gelegene Gebirge zeigt sich anhand der Tatsache, dass in der letzten Zonenreihe vor der Ortsbrust in Bild 6.173 keine Bereiche mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen entlang der Bohrlochkontur zu betrachten sind.

(d3) Schichtflächengefüge unter $\alpha = 45^\circ$ einfallend – Bohrloch im Streichen der Schichtflächen

Die Serie von Flächenplots in Bild 6.174 bis Bild 6.176 zeigt die Einteilung des Gebirges in die vier Versagenskategorien mit dem jeweiligen Gebirgstragverhalten für den Fall eines unter $\alpha = 45^\circ$ einfallenden Schichtflächengefüges mit einer Orientierung der Bohrlochlängsachse in Richtung des Streichens der Schichtflächen. Die Darstellung der Flächenplots in Bild 6.174 bis Bild 6.176 mit dem vollständigen kombinierten Tragsystem *Bohrloch-Strecke* in Bild 6.174, dem Ausschnitt aus Bild 6.174 mit einer vergrößerten Darstellung des Bohrlochmunds sowie des streckennahen Teufenbereichs des Bohrlochs in Bild 6.175 und abschließend dem Gebirgsbereich in der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochtieftsten in Bild 6.176 folgt der selben Systematik wie die Darstellung der Ergebnisse für die vorangegangene Variationsanalyse in Abschnitt 6.4.3.8(d2).

Gebirgsmechanisch komplexer als für den Fall eines horizontal gelagerten Schichtflächengefüges gestaltet sich die Situation bezüglich der im Gebirge vorherrschenden Schichtflächen-

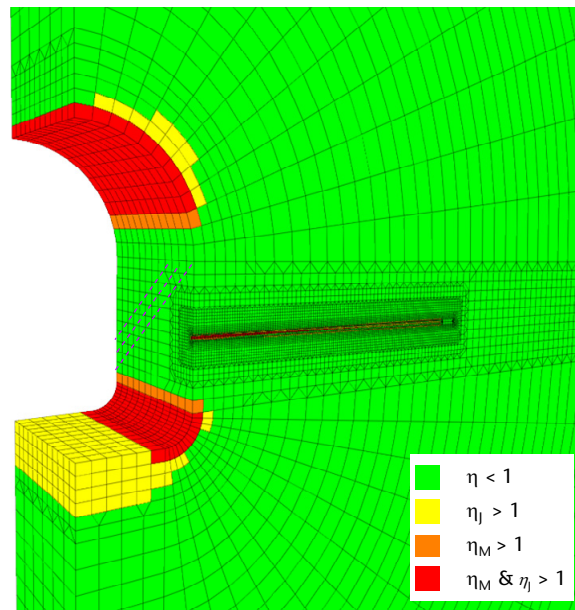


Bild 6.174: Darstellung von Gebirgsbereichen mit einem Ausnutzungsgrad von η_M & $\eta_J < 1$ (grün), $\eta_M < 1$ & $\eta_J > 1$ (gelb), $\eta_M > 1$ & $\eta_J < 1$ (orangefarben) und $\eta_M \& \eta_J > 1$ (rot) im Flächenplot für den Fall eines unter $\alpha = 45^\circ$ in Richtung der y-Achse einfallenden Schichtflächengefüges – Gesamttragsystem Strecke und Bohrloch

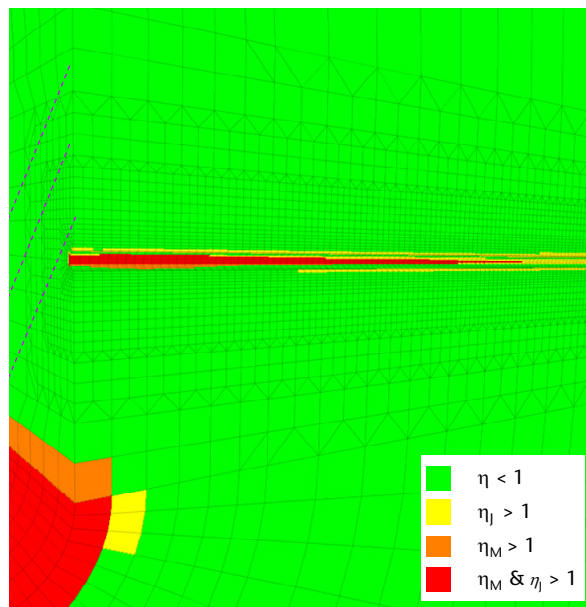


Bild 6.175: Darstellung von Gebirgsbereichen mit einem Ausnutzungsgrad von η_M & $\eta_J < 1$ (grün), $\eta_M < 1$ & $\eta_J > 1$ (gelb), $\eta_M > 1$ & $\eta_J < 1$ (orangefarben) und $\eta_M \& \eta_J > 1$ (rot) im Flächenplot für den Fall eines unter $\alpha = 45^\circ$ in Richtung der y-Achse einfallenden Schichtflächengefüges – Bohrloch

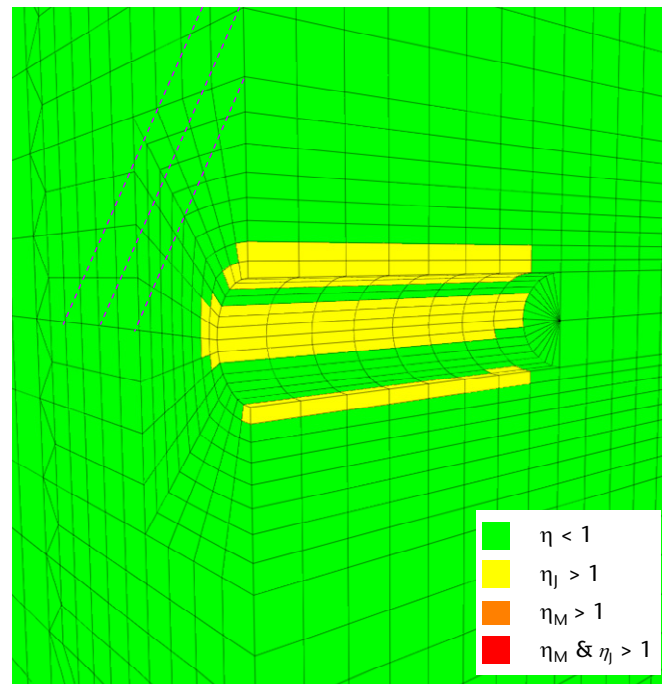


Bild 6.176: Darstellung von Gebirgsbereichen mit einem Ausnutzungsgrad von η_M & $\eta_J < 1$ (grün), $\eta_M < 1$ & $\eta_J > 1$ (gelb), $\eta_M > 1$ & $\eta_J < 1$ (orangefarben) und η_M & $\eta_J > 1$ (rot) im Flächenplot für den Fall eines unter $\alpha = 45^\circ$ in Richtung der y-Achse einfallenden Schichtflächengefüges – Bohrlochtiefstes

ausnutzungsgrade bei einer Orientierung der Streckenlängsachse orthogonal zum Streichen eines unter $\alpha = 45^\circ$ in Streckenlängsrichtung einfallenden Schichtflächengefüges. Während für den zuvor diskutierten Fall eines horizontal angeordneten Schichtflächengefüges die in Streckenlängsachsenrichtung wirkenden Spannungen stets parallel zum Schichtflächengefüge verlaufen und somit keinen Einfluss auf die berechneten Schichtflächenausnutzungsgrade ausüben, werden die Schichtflächen für die in Bild 6.174 zu betrachtende Anordnung des Schichtflächengefüges sowohl durch die Tangentialspannungen wie auch durch die in Streckenlängsrichtung verlaufenden Spannungen beansprucht. Gegenüber der Variationsanalyse für die gebirgsmechanische Situation des horizontal angeordneten Schichtflächengefüges in Abschnitt 6.4.3.8(d2) ändert sich bezüglich des Schichtflächentragverhaltens in der Umgebung der Streckenkontur insbesondere das Tragverhalten im Bereich der Streckensohle. Während in diesem Bereich bedingt durch den sich unterhalb der Streckensohle ausbildenden Druckschatten die orthogonal zur Streckenkontur verlaufenden Spannungen stark absinken, steigen die in Streckenlängsrichtung wirkenden Spannungen insgesamt leicht an. Bedingt durch die beschriebene Spannungsconstellation unterhalb der Streckensohle in Verbindung mit dem in Streckenlängsrichtung einfallenden Schichtflächengefüge ergibt sich bezüglich der



Belastung der Schichtflächen die Situation, dass relativ große, in Streckenlängsrichtung wirkende Spannungen belastend auf die Schichtflächen einwirken, während nur sehr kleine orthogonal zur Streckensohle wirkende Spannungen stabilisierend auf die Schichtflächen einwirken. Die tangential um die Streckenkontur herum verlaufenden Spannungen üben im Bereich der Streckensohle kaum einen Einfluss auf das Tragverhalten des Gebirges in den Schichtflächen aus.

Der beschriebenen gebirgsmechanischen Gesamtkonstellation ist auch die Tatsache geschuldet, dass für die betrachtete Variationsanalyse im Vergleich zur vorangegangenen Variationsanalyse mit einem horizontal gelagerten Schichtflächengefüge auch die unmittelbar entlang des Streckenfirstes angeordneten Gebirgszonen einen Ausnutzungsgrad des Gebirges in den Schichtflächen von $\eta_j > 1,0$ aufweisen. Der Gebirgsbereich mit einem zu erwartenden Versagen des Gebirges in den Schichtflächen erstreckt sich allerdings im unmittelbaren Firstbereich der Strecke nur eine Gebirgszone tief in das Gebirge hinein und nicht wie im Bereich der Streckensohle vier Gebirgszonen tief. Der Grund für das zu erwartende günstigere Tragverhalten der Schichtflächen im Gebirgsbereich nahe des Streckenfirstes im Vergleich zu dem im unterhalb der Streckensohle gelegenen Gebirgsbereich zu erwartenden Schichtflächentragverhalten ist die kreisrunde Ausformung des Streckenfirstbereichs. Bedingt durch die kreisförmige Gestaltung des Firstgewölbes bildet sich um das Firstgewölbe herum kein Druckschatten aus, sodass bereits innerhalb der zweiten Zonenreihe betrachtet von der Streckenkontur aus hinreichend große Radialspannungen vorherrschen können, um stabilisierend auf das Schichtflächengefüge einzuwirken und ein durch die Spannungen in Streckenlängsrichtung bedingtes Abscheren der Schichtflächen im Firstbereich der Strecke zu verhindern.

Während die bei der in Abschnitt 6.4.3.8(d3) betrachteten gebirgsmechanischen Konstellation im Sohlbereich der Strecke zu erwartenden Schädigungen des Gebirges in den Schichtflächen deutlich größer sind als die bei der in Abschnitt 6.4.3.8(d2) vorliegenden gebirgsmechanischen Konstellation zu erwartenden Schädigungen der Schichtflächen, verhält es sich für den Firstbereich der Strecke genau andersherum. Zwar ist der Konturbereich innerhalb des Firstgewölbes, in dem die Ausnutzungsgrade des Gebirges in den Schichtflächen einen Zahlenwert von $\eta_j > 1,0$ annehmen, etwas größer als für die in Abschnitt 6.4.3.8(d2) betrachtete gebirgsmechanische Konstellation, allerdings reichen die Gebirgsbereiche mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen nur drei Zonen weit anstelle von fünf Zonen weit in das Gebirge hinein. Interessanterweise ist für die geringere Tiefe des zu erwartenden Gebirgs-

bereichs mit Schädigungen des Gebirges in den Schichtflächen die stabilisierende Wirkung der in Streckenlängsrichtung wirkenden Spannungen, die im unmittelbaren Firstbereich sowie im Sohlbereich destabilisierend auf das Schichtflächengefüge einwirken, verantwortlich (siehe auch *Lux & Seeska, 2010*).

Bezüglich des Vergleichs des Bohrlochtragverhaltens ist zunächst anzumerken, dass sowohl für die in Abschnitt 6.4.3.8(d2) betrachtete gebirgsmechanische Konstellation wie auch für die in Abschnitt 6.4.3.8(d3) betrachtete gebirgsmechanische Konstellation die Bohrlochlängsachse parallel zu den Schichtflächen verläuft. In einem Gebirge mit isotropem Primärspannungszustand wäre somit bezüglich des Schichtflächentragverhaltens die Orientierung des Bohrlochs für beide betrachteten Variationsanalysen gleich ungünstig. Lediglich die Positionen entlang der Bohrlochkontur, an denen die Gebirgsbereiche mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen angeordnet wären, würden in Abhängigkeit von der Orientierung des Schichtflächengefüges gegenüber der Bohrlochlängsachse variieren, wobei jedoch sowohl die Ausdehnung der entsprechenden Bereiche entlang der Bohrlochkontur wie auch die Ausdehnung in das Gebirge hinein genau identisch wären.

Die Betrachtung von Bild 6.175 und insbesondere die Betrachtung von Bild 6.176 zeigen jedoch, dass die für die in Abschnitt 6.4.3.8(d3) betrachtete gebirgsmechanische Konstellation ermittelten, im Bereich der Bohrlochkontur zu erwartenden Schädigungen der Schichtflächen deutlich stärker ausgeprägt sind als die für die in Abschnitt 6.4.3.8(d2) betrachtete gebirgsmechanische Konstellation zu erwartenden Schädigungen des Gebirges in den Schichtflächen. Die Gebirgsbereiche, in denen Schichtflächenausnutzungsgrade mit einem Zahlenwert von $\eta_J > 1,0$ berechnet worden sind, reichen für den Fall der in Abschnitt 6.4.3.8(d3) betrachteten gebirgsmechanischen Konstellation tiefer in das Gebirge hinein und erstrecken sich auch weiter entlang der Bohrlochkontur als für den zuvor betrachteten Fall eines söhlig gelagerten Schichtflächengefüges.

Verantwortlich für die gemäß der durchgeführten Analyse zu erwartenden stärkeren Schädigungen der Bohrlochkontur im Falle des unter $\alpha = 45^\circ$ einfallenden Schichtflächengefüges ist der im Bereich des Streckennahfeldes vorherrschende, nicht isotrope Spannungszustand. Bedingt durch den Streckenvortrieb sind im Bereich des Streckennahfeldes die Tangentialspannungen stark angestiegen. Im Bereich des Bohrlochstoßes, von dem aus das Bohrloch horizontal in das Gebirge hinein abgeteuft worden ist, verlaufen die Tangentialspannungen der Strecke weitestgehend vertikal. Sie stellen somit näherungsweise die vertikalen Ausgangs-



spannungen für das Bohrlochabteufen dar. Da das Bohrloch somit in einem Gebirgsbereich abgeteuft worden ist, in dem die Vertikalspannungen oberhalb der Horizontalspannungen liegen, ergeben sich gemäß *Kirsch (1898)* bei der Analyse des Gebirgsspannungszustands unter der Annahme eines linear-elastischen Materialverhaltens, wie sie im Rahmen der durchgeführten numerischen Simulationsarbeiten getroffen worden ist, die größten Tangentialspannungen im Stoßbereich des Bohrlochs. Bei einer parallel zu den Schichtflächen verlaufenden Orientierung der Bohrlochlängsachse ist es somit für die zu erwartende Intensität der Schädigung der Schichtflächen entscheidend, wie die Schichtflächen gegenüber den im Stoßbereich der Bohrlochkontur vorherrschenden maximalen Tangentialspannungen orientiert sind.

Während bei der Annahme eines horizontal anstehenden Schichtflächengefüges die Schichtflächen in dem Gebirgsbereich mit den maximalen Tangentialspannungen derart angeordnet sind, dass die Tangentialspannungen orthogonal und somit stabilisierend auf das Schichtflächengefüge einwirken, durchlaufen für die in Abschnitt 6.4.3.8(d3) betrachtete gebirgsmechanische Konstellation die Schichtflächen den Stoßbereich des Bohrlochs mit den maximalen vorherrschenden Tangentialspannungen so, dass das Schichtflächengefüge durch die maximalen Tangentialspannungen des Bohrlochs unter einem Winkel von in etwa $\beta = 45^\circ$ belastet wird, was bezüglich des Schichtflächentragverhaltens als nahezu ungünstigste Konstellation zu betrachten ist.

Der Vergleich des zu erwartenden Schichtflächentragverhaltens in der Umgebung des modellierten Bohrlochs für die beiden durchgeführten Variationsanalysen verdeutlicht einmal mehr, dass es bei der Analyse des Tragverhaltens von untertägigen Hohlräumen unerlässlich ist, die gegenseitige Beeinflussung unterschiedlicher untertägiger Bauwerke zu berücksichtigen. Die Betrachtung des Tragverhaltens eines Bohrlochquerschnitts im Streckenfernfeld hätte für den Fall des Vergleichs der beiden unterschiedlichen gebirgsmechanischen Konstellationen zu keinem klaren Vorteil bezüglich des zu erwartenden Bohrlochtragverhaltens für eine der beiden Variationsanalysen geführt.

Die zwei durchgeführten ersten Variationsanalysen verdeutlichen somit schon, dass die Nichtbeachtung der gegenseitigen Beeinflussung des Tragverhaltens untertägiger Hohlräume insbesondere bezüglich der Beurteilung der Eignung zweier unterschiedlicher potenzieller Wirtsgesteinsformationen zur Implementierung eines Endlagers für radioaktive Abfälle mit unterschiedlichen Lagerungsformen des Schichtflächengefüges zu einem schwerwiegenden Beurteilungsfehler bezüglich der gebirgsmechanischen Eignung führen kann (→ Bewertung der



bautechnischen Machbarkeit), insbesondere dann, wenn eine gebirgsmechanisch optimale Anordnung der Grubenbaue (Infrastruktur, Ablagerungsbereich) nicht möglich ist bzw. auch noch eine Optimierung bezüglich eines anisotropen Primärspannungszustandes erfolgen muss.

(d4) Schichtflächengefüge unter $\alpha = 45^\circ$ einfallend – Strecke im Streichen der Schichtflächen

Die Darstellung der Berechnungsergebnisse für die letzte der drei durchgeführten Variationsanalysen erfolgt in der Serie von Flächenplots in Bild 6.177 bis Bild 6.179. Die Einteilung des Gebirges in die vier Versagenskategorien mit dem jeweiligen Gebirgstragverhalten ist in den dargestellten Flächenplots nunmehr für den Fall eines unter $\alpha = 45^\circ$ einfallenden Schichtflächengefüges mit einer Orientierung der Bohrlochlängsachse in orthogonaler Richtung zum Streichen der Schichtflächen erfolgt. Die Darstellung der Flächenplots erfolgt entsprechend derselben Systematik wie die Darstellung der Berechnungsergebnisse für die vorangegangenen zwei Variationsanalysen.

Die Betrachtung von Bild 6.177 verdeutlicht zunächst das enorme räumliche Ausmaß der Gebirgsbereiche mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen in der Umgebung der Streckenkontur, das bei einer Anordnung der Streckenlängsachse im Streichen der unter $\alpha = 45^\circ$ einfallenden Schichtflächen zu erwarten wäre. Die in Bild 6.177 zu betrachtenden, sehr großen Gebirgsbereiche mit zu erwartendem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen kommen zum einen durch die zuvor bereits ausführlich diskutierte Orientierung der Schichtflächen gegenüber den entlang des sich in der Umgebung der Streckenkontur ausbildenden Tragrings wirkenden maximalen Hauptspannungen zu Stande und werden zum anderen in ihrer Ausdehnung zusätzlich durch die geometrische Gestaltung des Streckenstoßes und der Streckensohle begünstigt. Bei der im Rahmen der hier diskutierten dritten Variationsanalyse betrachteten gebirgsmechanischen Konstellation wirken sowohl im Stoß der Strecke wie auch in der Streckensohle die parallel zu Stoß und Sohle gerichteten Tangentialspannungen belastend auf die Schichtflächen ein. Die Longitudinalspannungen der Strecke wirken parallel zum Schichtflächengefüge, sodass sie keinen Einfluss auf das Schichtflächentragverhalten ausüben. Stabilisierend könnten somit allenfalls orthogonal zum Streckenstoß und zur Streckensohle verlaufende Spannungen auf das Schichtflächengefüge einwirken. Da für den Fall

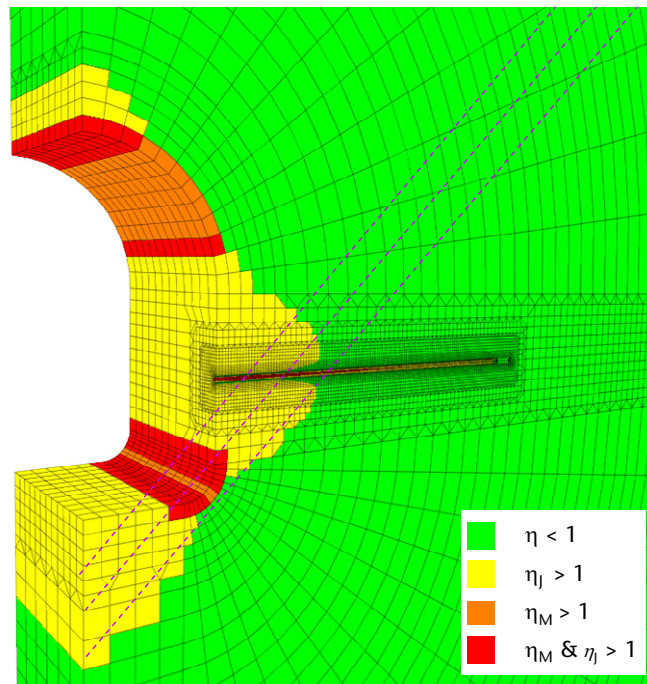


Bild 6.177: Darstellung von Gebirgsbereichen mit einem Ausnutzungsgrad von η_M & $\eta_J < 1$ (grün), $\eta_M < 1$ & $\eta_J > 1$ (gelb), $\eta_M > 1$ & $\eta_J < 1$ (orangefarben) und η_M & $\eta_J > 1$ (rot) im Flächenplot für den Fall eines unter $\alpha = 45^\circ$ in Richtung der x-Achse einfallenden Schichtflächengefüges – Gesamttragsystem Strecke und Bohrloch

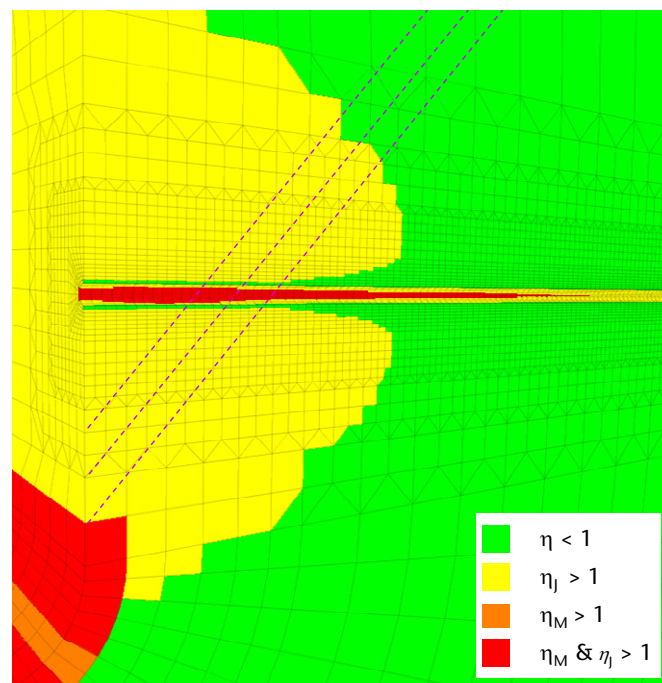


Bild 6.178: Darstellung von Gebirgsbereichen mit einem Ausnutzungsgrad von η_M & $\eta_J < 1$ (grün), $\eta_M < 1$ & $\eta_J > 1$ (gelb), $\eta_M > 1$ & $\eta_J < 1$ (orangefarben) und η_M & $\eta_J > 1$ (rot) im Flächenplot für den Fall eines unter $\alpha = 45^\circ$ in Richtung der x-Achse einfallenden Schichtflächengefüges – Bohrloch

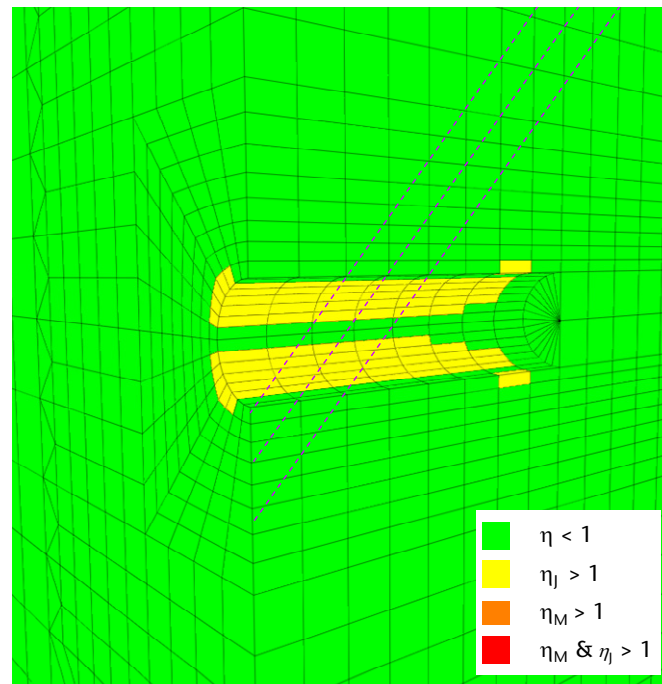


Bild 6.179: Darstellung von Gebirgsbereichen mit einem Ausnutzungsgrad von $\eta_M \ \& \ \eta_J < 1$ (grün), $\eta_M < 1 \ \& \ \eta_J > 1$ (gelb), $\eta_M > 1 \ \& \ \eta_J < 1$ (orange) und $\eta_M \ \& \ \eta_J > 1$ (rot) im Flächenplot für den Fall eines unter $\alpha = 45^\circ$ in Richtung der x-Achse einfallenden Schichtflächengefüges –Bohrlochtiefstes

eines unausgebauten Hohlraumes, wie er im Rahmen dieses Vorhabens betrachtet wird, orthogonal zur Streckenkontur jedoch lediglich der atmosphärische Luftdruck wirkt, gibt es für die im Rahmen der dritten Variationsanalyse betrachtete gebirgsmechanische Gesamtsituation im Bereich des Streckenstoßes und im Bereich der Streckensohle keine Spannungskomponente, die signifikant stabilisierend auf das Schichtflächengefüge einwirken könnte.

Die kombinierte Betrachtung von Bild 6.178 und Bild 6.179 zeigt, dass bei der angesetzten gebirgsmechanischen Konstellation über die komplette Länge des Bohrlochs mit einem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen entlang weiter Teile der Bohrlochkontur zu rechnen ist. In Bild 6.178 ist zu erkennen, dass entlang der ersten 5 Meter des Bohrlochs mit Ausnahme des Bohrlochsfirses und der Bohrlochsohle alle Bereiche der Bohrlochkontur von zu erwartendem Schichtflächenversagen betroffen sind. Der Darstellung in Bild 6.179 kann entnommen werden, dass in dem unmittelbar dem Bohrlochtiefsten vorgelagerten Teufenbereich neben der Bohrlochfirste und der Bohrlochsohle auch unmittelbar im Bereich des Bohrlochstoßes Ausnutzungsgrade des Gebirges in den Schichtflächen mit Zahlenwerten von $\eta_J < 1,0$ vorliegen. Die Entlastung der Schichtflächen im Stoßbereich des Bohrlochs mit zunehmender Entfernung des betrachteten Bohrlochquerschnitts von der Streckenkontur kann durch das



Anwachsen der stabilisierend auf die Schichtflächen einwirkenden Spannungen in Bohrloch-längsrichtung sowie auf die Abnahme der belastend auf die Schichtflächen im Stoßbereich einwirkenden Tangentialspannungen des Bohrlochs bei zunehmendem Abstand von der Streckenkontur erklärt werden.

Ein interessantes, wenngleich auch aus gebirgsmechanischer Sicht als numerisches Artefakt einzustufendes Phänomen lässt sich der detaillierten Betrachtung von Bild 6.178 entnehmen. Während nahezu der gesamte Stoßbereich der Strecke auf Basis der durchgeführten rechnerischen Analyse als von einem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen bedroht einzustufen ist, lassen sich entlang der Kontur des Bohrlochs unmittelbar in der Bohrlochfiste und in der Bohrlochsohle zwei streifenartig geformte Bereiche innerhalb des durch Schichtflächenversagen bedrohten Streckennahfeldes identifizieren, in denen Ausnutzungsgrade des Gebirges in den Schichtflächen von $\eta_J < 1,0$ berechnet worden sind. Die scheinbare Entlastung der beiden Bereiche in Bohrlochfiste und Bohrlochsohle ist durch den im Rahmen des Bohrlochabteufens erfolgten Abbau der radial zur Bohrlochkontur wirkenden, die Schichtflächen stark belastenden Vertikalspannungen in den betreffenden Bereichen hervorgerufen worden.

Bei der Bild 6.178 zu entnehmenden zu erwartenden Schädigungsfreiheit der Schichtflächen im Bereich von Bohrlochstoß und Bohrlochsohle handelt es sich selbstverständlich um ein berechnungstechnisches Artefakt, das dadurch zu Stande gekommen ist, dass im Rahmen der durchgeführten numerischen Analyse die sich überlagernden Sekundärspannungsfelder von Streckenabschnitt und Bohrloch hinsichtlich der Versagensanalyse nicht zeitlich getrennt voneinander betrachtet worden sind. Zur realitätsnäheren Darstellung von Gebirgsbereichen mit zu erwartendem Schichtflächenversagen wäre es erforderlich gewesen, den sich im Gebirge nach dem Vortrieb des Streckenabschnitts einstellenden Zustand zunächst getrennt von der Simulation des Bohrlochvortriebs zu betrachten. Für diesen Fall wäre dann für das komplette Gebirge im Stoßbereich innerhalb der ersten 2 m von der Streckenkontur aus in das Gebirge hinein eine zu erwartende Schädigung des Gebirges in den Schichtflächen berechnet worden.

6.4.3.9 Fazit zum Vergleich der Simulatoren FLAC^{3D} und FTK

Der im Rahmen der Erstellung des vorliegenden Berichts durchgeführte Vergleich von Simulationsergebnissen, die mit dem etablierten kommerziellen Simulator FLAC^{3D} einerseits und mit dem am LfD&G neu entwickelten FTK-Simulator andererseits generiert worden sind, hat

für den untersuchten Bereich der hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulation unter der Annahme eines zu jedem Simulationszeitpunkt vorherrschenden hydraulischen Einphasenflusses insgesamt zu sehr guten Vergleichsergebnissen geführt.

Zur Durchführung des Vergleichs sind drei unterschiedliche Berechnungsmodelle zum Einsatz kommen, mit denen sowohl mit dem Simulator FLAC^{3D} sowie auch mit dem FTK-Simulator hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnungen unter Ansatz eines isotropen linear-elastischen Materialverhaltens durchgeführt worden sind. Bei den drei Berechnungsmodellen hat es sich, wie den Ausführungen in Abschnitt 6.4.3.1 zu entnehmen ist, um das quasi-zweidimensionale scheibenartige Modell eines Bohrlochs sowie um ein dreidimensionales Bohrlochmodell mit Simulation eines Bohrlochabteufens und schließlich um das quasi-zweidimensionale Modell eines Streckenabschnitts gehandelt.

Für alle drei untersuchten Modelltypen konnten bezüglich aller untersuchten Zustandsgrößen in weiten Teilen der Modelle nahezu exakte Ergebnisübereinstimmungen mit relativen Ergebnisabweichungen im Bereich von $\Delta_{\text{rel}} < 1\%$ ermittelt werden. Signifikante Ergebnisabweichungen in Größenordnungen von mehreren Prozent bis hin zu im Einzelfall maximal $\Delta_{\text{rel}} \leq 70\%$ sind dagegen eher lokal und ausschließlich unmittelbar entlang der Hohlraumkonturen im modellierten Gebirge im Rahmen des Ergebnisvergleichs festzustellen gewesen.

Der detaillierten Darstellung der für die drei unterschiedlichen Berechnungsmodelltypen durchgeführten Ergebnisvergleiche im vorangehenden Abschnitt 6.4.3 kann entnommen werden, dass sich die insgesamt besten Ergebnisübereinstimmungen für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Bohrlochmodell mit dem vergleichsweise einfachsten Modellaufbau und der einfachen kreisrunden Hohlraumgeometrie ergeben haben. Für alle im Rahmen des durchgeführten Ergebnisvergleichs explizit betrachteten Zustandsgrößen liegen die durch die Verwendung der beiden unterschiedlichen Simulatoren zustande gekommenen relativen Ergebnisabweichungen für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Bohrlochmodell im Zahlenwertebereich $\Delta_{\text{rel}} < 8\%$. Zu deutlich größeren relativen Ergebnisabweichungen hat die Verwendung der beiden unterschiedlichen Simulatoren bei der dreidimensionalen Simulation des Bohrlochabteufens unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrlochmodells insbesondere bezüglich der generierten Porenwasserdrücke geführt. Die während der Simulation des Bohrlochabteufens bezüglich der Porenwasserdrücke feststellbaren relativen Ergebnisabweichungen mit Zahlenwerten von lokal bis zu $\Delta_{\text{rel}} \approx 70\%$ haben sich allerdings auf wenige Ge-



birgszonen beschränkt, die zum einen an den Modellrändern des dreidimensionalen Bohrloch-Viertelmodells und zum anderen unmittelbar im Bereich des Bohrlochtieftsten gelegen haben.

Die zweitgrößten Ergebnisabweichungen, die im Rahmen des durchgeführten Ergebnisvergleichs festzustellen gewesen sind, haben sich ebenfalls bezüglich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren ermittelten Porenwasserdrücke ergeben – und zwar für die Berechnungen, die am quasi-zweidimensionalen Streckenmodell vorgenommen worden sind. Für das quasi-zweidimensionale Streckenmodell sind bezüglich der generierten Porenwasserdrücke sowie auch für alle anderen betrachteten Zustandsgrößen in weiten Teilen des Modells hervorragende Ergebnisübereinstimmungen, die zum Teil sogar die für das quasi-zweidimensionale scheibenartige Bohrlochmodell festgestellten Ergebnisübereinstimmungen an Präzision noch übertroffen haben, identifiziert worden. Auch im unmittelbar an die Strecke angrenzenden Gebirgsbereich sind in weiten Teilen der geometrisch im Vergleich zur Kontur des modellierten Bohrlochs komplexeren Streckenkantur keine signifikanten relativen Ergebnisabweichungen diagnostiziert worden. Die große Ausnahme bezüglich der sehr guten Ergebnisübereinstimmungen insbesondere in Bezug auf die berechneten Porenwasserdrücke bilden die beiden entlang der Streckenkantur angeordneten Übergangsbereiche vom Firstgewölbe zum Streckenstoß bzw. vom Streckenstoß zur Streckensohle. Dem kreisrund geformten Firstbereich sowie dem ebenfalls kreisrund geformten Übergangsbereich vom Streckenstoß zur Streckensohle ist gemeinsam, dass in den beiden Bereichen gegenüber den weiteren konturnahen Gebirgsbereichen stark erhöhte maximale Hauptspannungen auftreten. Insbesondere gilt dieser Sachverhalt für den im Vergleich zum Firstbereich weitaus stärker gekrümmten Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle. Während für die Berechnungen, die mit dem FTK-Simulator durchgeführt worden sind, in den beiden entlang der Streckenkantur gelegenen Übergangsbereichen keine besonderen Zahlenwerterhöhungen bezüglich der generierten Porenwasserdrücke analysiert werden konnten, weisen die mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Porenwasserdrücke in den beiden beschriebenen Streckenkanturbereichen stark erhöhte Zahlenwerte auf. Besonders groß sind die bezüglich der Porenwasserdrücke analysierten Differenzen im Übergangsbereich zwischen Streckenstoß und Streckensohle, also innerhalb des Bereichs, in dem besonders große maximale Hauptspannungen vorliegen. In diesem Gebirgsbereich betragen die relativen Ergebnisabweichungen zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren ermittelten Porenwasserdrücken bis zu $\Delta_{rel} \approx 57\%$.



Es lässt sich somit zusammenfassend festhalten, dass große Ergebnisunterschiede hauptsächlich bezüglich der berechneten Porenwasserdrücke auftreten, und dass während in weiten Teilen aller drei untersuchten unterschiedlichen Modelle durchaus sehr zufriedenstellende Ergebnisübereinstimmungen auch bezüglich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Porenwasserdrücke festzustellen gewesen sind, die großen relativen Ergebnisabweichungen in solchen Modellbereichen auftreten, in denen eine aus geometrischer Sicht komplexere Situation vorliegt, wie zum Beispiel direkt vor dem Bohrlochtiefsten oder in den Übergangsbereichen zwischen zwei geometrischen Strukturen entlang einer Hohlraumkontur.

Auch wenn in allen drei zum Einsatz gekommenen Berechnungsmodelltypen in weiten Modellbereichen für alle betrachteten Zustandsgrößen sehr gute Ergebnisübereinstimmungen erzielt werden konnten, sodass der durchgeführte Vergleich von mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Berechnungsergebnissen insgesamt als erfolgreich bezeichnet werden kann, so sollte doch im Rahmen zukünftiger Forschungs- und Entwicklungsarbeiten der Versuch unternommen werden, auch für die wenigen Gebirgsbereiche innerhalb der Modelle, in denen bisher keine zufriedenstellenden Ergebnisübereinstimmungen erreicht werden konnten und die sich wie beschrieben in Gebirgsbereichen mit geometrisch komplexen Konstellationen befinden, noch eine mindestens befriedigende Übereinstimmung der Simulationsergebnisse herzustellen.

Für die in Zukunft durchzuführenden wissenschaftlichen Arbeiten zur Weiterentwicklung des FTK-Simulators sollte im Vorfeld der Anspruch formuliert werden, die vollständige Übereinstimmung zwischen den mittels der beiden Simulatoren zu erzielenden Berechnungsergebnissen unabhängig von der zu simulierenden gebirgsmechanischen Situation und unabhängig von den gewählten Hohlraumgeometrien zu erreichen. Ein wichtiger, bereits im Rahmen der bisher durchgeführten und vorangehend dokumentierten numerischen Arbeiten identifizierter Schritt in Richtung einer vollständigeren Ergebnisübereinstimmung zwischen den mit dem FTK-Simulator und den mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ generierten Berechnungsergebnissen ist die Integration einer Routine zum programminternen Umgang mit nicht *Voronoi*-artigen Diskretisierungsstrukturen in den am LfD&G entwickelten FTK-Simulator. Im Rahmen der bisher durchgeführten und in dem vorliegenden Bericht beschriebenen numerischen Simulationsarbeiten zeigt das Beispiel des quasi-zweidimensionalen Streckenabschnittsmodells, bei dessen Diskretisierung besonderer Wert auf die möglichst *Voronoi*-artige Struktur des stre-

ckennahen Gebirges gelegt wurde, welchen großen Einfluss auf die Ergebnispräzision diese Art der Modelldiskretisierung ausübt.

Ein großer Vorteil bei der Anwendung des FTK-Simulators besteht, wie in Abschnitt 6.4.3.4 ausführlich beschrieben worden ist, in der Möglichkeit, bei abnehmender hydraulischer Aktivität innerhalb des modellierten Gebirgsbereiches den hydraulischen Zeitschritt exponentiell anwachsen zu lassen und die benötigten Echtzeiten zur Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Analysen somit signifikant zu reduzieren. Bezüglich der vorangehend in Abschnitt 6.4.3 beschriebenen numerischen Simulationsarbeiten zeigt sich die Zeitersparnis, die durch die Anwendung des FTK-Simulators im Vergleich zur Anwendung des Simulators FLAC^{3D} erzielt werden kann, besonders eindrucksvoll am Beispiel des quasi-zweidimensionalen Streckenabschnittsmodell sowie darüber hinaus am dreidimensionalen Bohrloch-Streckenmodell. Aufgrund der Tatsache, dass während der Durchführung einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulation mit dem Simulator FLAC^{3D} der hydraulische Zeitschritt auf einen zu Beginn der Berechnung programmintern festgelegten Zahlenwert fixiert ist, während bei der Durchführung einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulationen unter Verwendung des FTK-Simulators der hydraulische Zeitschritt in Abhängigkeit von der im Modell vorherrschenden hydraulischen Aktivität angepasst werden kann, ergeben sich für das quasi-zweidimensionale Streckenabschnittsmodell zur Durchführung der Berechnungen benötigte Echtzeiten von $t \approx 12$ h für die Berechnung mit dem FTK-Simulator und von $t \approx 12$ Wochen für die Berechnung mit dem Simulator FLAC^{3D}.

Während unter Verwendung des FTK-Simulators die Durchführung der Berechnung für das dreidimensionale kombinierte Bohrloch-Streckenmodell eine Echtzeit von $t \approx 18$ d in Anspruch genommen hat, ist, wie in Abschnitt 6.4.3.4 ausführlich beschrieben worden ist, eine Durchführung einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulationen für das dreidimensionale kombinierte Bohrloch-Streckenmodell mit dem Simulator FLAC^{3D} aufgrund der zu erwartenden theoretisch ermittelten Echtzeiten in der Größenordnung von $t \approx 20$ a nicht möglich gewesen.

Das Diagramm in Bild 6.180 veranschaulicht das Verhältnis der für die Durchführung der Berechnung für das dreidimensionale kombinierte Bohrloch-Streckenmodell mit dem FTK-Simulator benötigten Rechenzeit zu der theoretisch ermittelten Rechenzeit, die für die Berechnung mit dem Simulator FLAC^{3D} notwendig gewesen wäre. Um eine Gegenüberstellung der sich um einen Faktor in der Größenordnung von $F \approx 400$ unterscheidenden benötigten

Berechnungszeiträume innerhalb eines Balkendiagramms zu ermöglichen, ist im Diagramm in Bild 6.180 eine logarithmische Skalierung der Zeitachse vorgenommen worden.

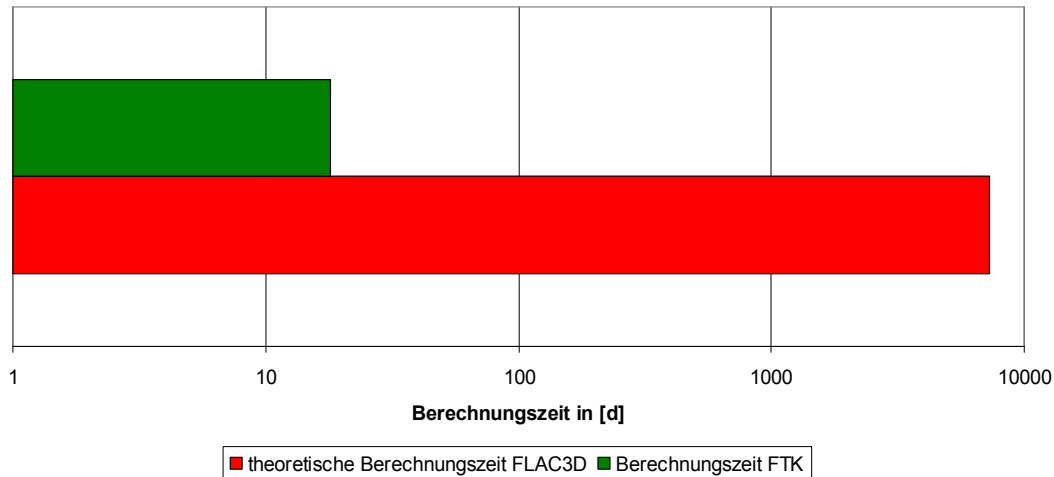


Bild 6.180: Gegenüberstellung der vom FTK-Simulator benötigten Berechnungszeit zur Durchführung der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnung unter Verwendung des kombinierten Bohrloch-Strecken-Modells (grüner Balken) mit der vom Simulator FLAC^{3D} theoretisch zur Durchführung der gleichen Berechnung benötigten Berechnungszeit (roter Balken) mit logarithmischer Skalierung der Zeitachse

In der Reduzierung der für die Durchführung der numerischen Simulationen benötigten Rechenzeiten aus einer Größenordnung heraus, die oberhalb der tatsächlich zu simulierenden Realzeiträume liegt, in eine Größenordnung von aus ingenieurtechnischer Sicht als sinnvoll und überschaubar zu betrachtenden Berechnungszeiträumen hinein offenbart sich einer der größten Vorteile, den die Verwendung des FTK-Simulators gegenüber der Verwendung des Simulators FLAC^{3D} insbesondere bei der Simulation von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Abläufen im Gebirge beim Vorliegen einer komplexen gebirgsmechanischen Situation, wie sie zum Beispiel durch zwei sich gegenseitig in Ihrem Tragverhalten beeinflussende untertägige Hohlräume gegeben ist, mit sich bringt.

Allerdings haben die durchgeführten numerischen Arbeiten auch aufgezeigt, dass die Wahl der Zeitschrittsteigerungsrate bei der Verwendung des FTK-Simulators einen Einfluss auf die Simulationsergebnisse ausübt und dass eine durch die Wahl eines zu großen Zeitschrittsteigerungsfaktors bedingte zu progressive Steigerung des hydraulischen Zeitschritts zur Fehlerhaftigkeit der generierten Simulationsergebnisse führen kann. Die Anwendung der im Rahmen der Erstellung des vorliegenden Berichts zum Einsatz gekommenen Version des FTK-Simulators erfordert daher eine gewisse Vorqualifikation des Anwenders bezüglich der Durchfüh-



rung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen. Eine weitere Optimierung zur Optimierung des FTK-Simulators im Rahmen zukünftiger Entwicklungsarbeiten besteht daher in der Schaffung einer automatisierten programminternen Vorgehensweise zur Steigerung des hydraulischen Zeitschritts anhand von feststehenden Kriterien, die auch für den weniger geübten Anwender das Generieren von realitätsnahen und fehlerfreien Resultaten mittels der Anwendung des FTK-Simulators ermöglicht.

Trotz des identifizierten, zukünftig zu bewältigenden Entwicklungsbedarfs in Bezug auf die Zeitschrittsteuerung und in Bezug auf die programminterne Weiterverarbeitung nicht *Voronoi*-artiger Diskretisierungsstrukturen ist hier nochmals hervorzuheben, dass alle im Rahmen des durchgeführten Ergebnisvergleichs zwischen dem Simulator FLAC^{3D} und dem FTK-Simulator identifizierten Ergebnisabweichungen im Vergleich zu den Streubreiten, die häufig im Bereich geomechanischer laborativer Untersuchungen zur Bestimmung von Gesteinsparametern zu beobachten sind oder im Vergleich zu den numerischen Streubreiten, die durch unzureichende Diskretisierungen hervorgerufen werden können sowie im Vergleich zu den Ungewissheiten, die bei der Anpassung der laborativ ermittelten Gesteinsparameter zur repräsentativen Wiedergabe der Gebirgseigenschaften (\rightarrow *upscaling*) mit einzubeziehen sind, eher als gering zu bezeichnen sind.

Auch wenn bezüglich der Performance des FTK-Simulators noch ein gewisser Entwicklungsbedarf besteht, haben die im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten numerischen Simulationsarbeiten zum Vergleich der Simulatoren FLAC^{3D} und FTK-Simulator aufgezeigt, dass für die Zukunft mit dem FTK-Simulator ein neues sehr leistungsstarkes Werkzeug zur Durchführung von komplexen hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Analysen zur Verfügung steht, wie sie beispielsweise zur Prognose des Tragverhaltens (TM-H-Analyse) oder des Langzeitverhaltens (TH-M-Analyse) eines potenziellen Endlagers im Tongestein erforderlich werden können. Unter Verwendung des FTK-Simulators werden zur Durchführung derartiger Analysen bei gleichen hydraulischen Parametern in Zukunft erheblich geringere Berechnungszeiten erforderlich sein als bei der Verwendung von FLAC^{3D}. Darüber hinaus sind bei der Verwendung des FTK-Simulators auch bei höheren hydraulischen Durchlässigkeiten des Gebirges in Kombination mit komplexen Gebirgsformations- und Hohlraumgeometrien noch numerische Simulationen innerhalb von vertretbaren Rechenzeiten durchführbar.



6.4.3.10 Fazit zur numerischen Analysierbarkeit des Tragverhaltens der Observationsbohrlöcher

Die vorangehenden Ausführungen in Abschnitt 6.4.3.9 verdeutlichen, dass mit dem FTK-Simulator ein sehr leistungsfähiges numerisches Instrument zur Generierung qualitativ hochwertiger Simulationsergebnisse bei der Durchführung hydraulisch-mechanisch gekoppelter gebirgsmechanischer Analysen zur Verfügung steht. Insbesondere die in Abschnitt 6.4.3.8 vorgestellten Simulationsergebnisse der mit dem FTK-Simulator für das dreidimensionale kombinierte Bohrloch-Streckenmodell durchgeführten numerischen Berechnungen verdeutlichen die numerische Leistungsfähigkeit des neu entwickelten Simulators.

Die Diskussion der in Abschnitt 6.4.3.8 dargestellten Berechnungsergebnisse für das dreidimensionale Bohrloch-Streckenmodell verdeutlicht neben der Leistungsfähigkeit des FTK-Simulators die Notwendigkeit der kombinierten Betrachtung von sich gegenseitig in ihrem geomechanischen Verhalten beeinträchtigenden untertägigen Bauwerken zur realitätsnäheren Abbildung ihres Tragverhaltens im Rahmen der numerischen Simulation. Mittels der durchgeführten numerischen Simulationsarbeiten ist der Beleg erbracht worden, dass am LfD&G nach der Kopplung der beiden Programmcodes $FLAC^{3D}$ und TOUGH2 genau diese Möglichkeit der kombinierten Betrachtungsweise zweier aneinandergrenzender oder nah beieinander liegender untertägiger Bauwerke auch im Rahmen einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Analyse vorhanden ist. Somit ist durch die Kopplung der beiden Programmcodes $FLAC^{3D}$ und TOUGH2 auch ein entscheidender Schritt zur realitätsnäheren Abbildung des in Abschnitt 3.1 zu betrachtenden, im Rahmen dieses Vorhabens in situ observierten, stark durch hydraulisch-mechanisch gekoppelte Prozesse beeinflussten Bohrlochtragverhaltens unternommen worden.

Von entscheidender Bedeutung bei der numerischen Analyse des Tragverhaltens der untertägigen Hohlräume im Verbundsystem *Bohrloch-Strecke* ist im Kontext dieses Vorhabens die Tatsache, dass der Fokus der numerischen Arbeiten nicht auf der Analyse des durch das Bohrlochabteufen beeinflussten Streckentragverhaltens gelegen hat, sondern genau andersherum auf der Analyse des durch das Vorhandensein des Streckenabschnitts beeinflussten Bohrlochtragverhaltens. Somit hat das Hauptaugenmerk bei der numerischen Analyse der gegenseitigen geomechanischen und geohydraulischen Beeinflussung eines großmaßstäblichen und eines kleinmaßstäblichen untertägigen Tragwerks auf dem aus der gegenseitigen Beeinflussung resultierenden Tragverhalten des kleinmaßstäblichen untertägigen Tragwerks gelegen. Aus

der Fokussierung auf das Tragverhalten des kleinmaßstäblichen Bohrlochs hat ein besonderer Anspruch an die Feinheit der Diskretisierung des Gebirges in der unmittelbaren Umgebung der Bohrlochkontur resultiert, woraus sich, wie aus den Ausführungen in Abschnitt 6.4.3.4 folgt, wiederum eine sehr große Zonenanzahl im dreidimensionalen kombinierten Bohrloch-Streckenmodell ergeben hat.

Die im Rahmen der Anfertigung des vorliegenden Berichts mit dem FTK-Simulator unter Verwendung des dreidimensionalen kombinierten Bohrloch-Streckenmodells durchgeführten numerischen Simulationen haben aufgezeigt, dass mit dem FTK-Simulator aufgrund seiner hohen Leistungsfähigkeit hydraulisch-mechanisch gekoppelte numerische Analysen an einem derart komplexen und bezüglich seiner Zonenanzahl großen Modell, wie es das Bohrloch-Streckenmodell darstellt, innerhalb von akzeptablen Zeiträumen möglich sind. Bei der durch die im Rahmen der Erstellung des vorliegenden Berichts vorgenommenen numerischen Analysen ausführlich erprobten Leistungsfähigkeit des FTK-Simulators wäre es für zukünftige numerische Analysen sogar möglich, unter Inkaufnahme von noch größeren Zonenanzahlen im Modell eine noch feinere Diskretisierung des Gebirges in der Umgebung des Bohrlochs sowohl zur Optimierung der Simulation des Abteufens in Bohrlochlängsrichtung so wie auch zur Optimierung der Abbildbarkeit des Matrix- und Schichtflächentragverhaltens in radialer und tangentialer Richtung zur Bohrlochkontur vorzunehmen. Somit sind die systematisch innerhalb der Observationsbohrlöcher auftretenden zwei Hauptversagensmechanismen unter Verwendung des FTK-Simulators sehr gut im Rahmen einer hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Analyse unter Berücksichtigung der Beeinflussung des Bohrlochtragverhaltens durch das Streckennahfeld abbildbar. Ein typisches Beispiel für das systematisch innerhalb der im URL Mont Terri untersuchten Observationsbohrlöcher auftretende Schichtflächenversagen kann in Bild 3.48 betrachtet werden. Ein klassisches Versagen der Gebirgsmatrix, wie es ebenfalls im Rahmen der in Abschnitt 3.1 beschriebenen in situ-Arbeiten in den Bohrlochern des URL Mont Terri beobachtet worden ist, zeigt Bild 3.37.

Das systematisch innerhalb der Observationsbohrlöcher auftretende Matrix- und Schichtflächenversagen kann sehr gut unter Verwendung des FTK-Simulators abgebildet werden. Dagegen stellen die zahlreichen nicht erkennbar systematisch und eher unregelmäßig innerhalb der Observationsbohrlöcher auftretenden Versagensmechanismen wie beispielsweise Bohrlochwandabschalungen, Gesteinsabplatzungen aus der Bohrlochwand heraus oder durch lokal begrenzte Porenwasserzutritte bedingte Gesteinsaufweichungen mit einhergehenden Bohr-



lochkonturveränderungen eine große Herausforderung bezüglich ihrer realitätsnahen Abbildbarkeit durch die Anwendung von auf kontinuumsmechanischen Grundsätzen aufbauenden numerischen Simulatoren wie FLAC^{3D} oder eben dem FTK-Simulator dar. Einflüsse auf das observierte Bohrlochtragverhalten wie beispielsweise Schwächezonen im Gebirge, Einschlüsse im Gestein, Gesteinsfaziesübergänge, stärker wasserführende Gebirgsschichten oder lokale Wasserreservoirs im Gebirge sind daher im Rahmen der durchgeführten numerischen Simulationsarbeiten nicht berücksichtigt worden und werden auch in Zukunft nur bedingt in eine kontinuumsmechanische Analyse integrierbar sein.

Drei weitere Aspekte, die im Rahmen der in dem vorliegenden Bericht beschriebenen numerischen Simulationsarbeiten zunächst keine Berücksichtigung gefunden haben, die aber von großer Bedeutung für die Prognose und Analyse des Trag- und Deformationsverhaltens sowie darüber hinaus auch des Langzeitsicherheitsverhaltens von untertägigen Hohlräumen in Tongesteinsformationen sind, sind

- (1) die hydraulische Anisotropie des geschichtet aufgebauten Tongesteins,
- (2) die Ausbildung teilgesättigter Gebirgsbereiche in der Umgebung der untertägigen Hohlräume durch die Erhitzung und Luftspülung beim Bohrprozess oder durch nach dem Vortrieb oder nach dem Abteufen erfolgende, zeitabhängige Austrocknungsprozesse infolge Bewetterung (Zweiphasenfluss) und
- (3) die Beeinflussung der mechanischen Festigkeits- und Verformungseigenschaften des Tongesteins durch den im Gestein vorherrschenden Feuchtigkeitsgehalt innerhalb der teilgesättigten Gebirgsbereiche (zunächst entsättigungsbedingte Verfestigungsprozesse mit einer Erhöhung der Gebirgsfestigkeit und der Gebirgssteifigkeit und anschließend bei weiter voranschreitender Entsättigung Zerfallsprozesse mit Kohäsionsverlust und Rissbildung) oder bei Resättigung Entfestigungsprozesse infolge von Konsistenzänderungen.

Die schichtungsgefügebedingte hydraulische Anisotropie von Tongesteinsformationen kann dazu führen, dass die hydraulische Permeabilität des Gebirges parallel zur Orientierung des Schichtungsgefüges um eine oder auch mehrere Größenordnungen höher ist als die hydraulische Permeabilität des Gebirges orthogonal zur Anordnung der Schichtflächen. Somit hat eine innerhalb einer Tongesteinsformation vorliegende hydraulische Anisotropie einen entscheidenden Einfluss auf die sich nach dem Ausbruch eines Hohlraums im Gebirge einstellende Porenwasserdruckverteilung. Darüber hinaus wird auch eine sich in der Umgebung des unter-



tägigen Hohlraums unter Umständen ausbildende entsättigte oder teilgesättigte Zone in ihrer räumlichen Ausbildung entscheidend durch eine im Gebirge vorhandene Anisotropie bezüglich der hydraulischen Leitfähigkeit geprägt. Es ist daher zur realitätsnäheren Abbildung des geomechanisch-geohydraulisch gekoppelten Verhaltens des Gebirges in der Umgebung von untertägigen Hohlräumen in Tongesteinsformationen unbedingt erforderlich, die Möglichkeit zur Berücksichtigung einer hydraulischen Anisotropie des Gebirges im Rahmen zukünftiger Entwicklungsarbeiten in den FTK-Simulators zu integrieren.

Anders als die Möglichkeit zur Berücksichtigung einer hydraulischen Anisotropie des Gebirges ist die Möglichkeit zur Berücksichtigung der Ausbildung teilgesättigter Gebirgsbereiche in der Umgebung von untertägigen Hohlräumen mit einem dann innerhalb der teilgesättigten Bereiche stattfindenden Zwei- oder Mehrphasenfluss bereits Bestandteil des FTK-Simulators. Eine ausführliche Befassung mit der Thematik der Simulation von Zwei- oder Mehrphasenfluss im Gebirge erfolgt in Abschnitt 7 des vorliegenden Berichtes sowie insbesondere auch in *Wolters (2014)* und *Rutenberg (in Vorbereitung)*.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass eine vollständig realitätsgetreue Abbildung des Trag- und Deformationsverhaltens von Bohrlöchern innerhalb einer geomechanisch-geohydraulisch komplexen Gesamtsituation, wie sie für die in Abschnitt 3.1 vorgestellten Observationsbohrlöcher vorliegt (z.B. unterschiedliche Gesteinsfaziestypen, Faziesübergänge, Schichtflächen, Trennflächen, anisotrope hydraulische Durchlässigkeiten, bevorzugte Wasserwegsamkeiten) wohl eher nicht möglich sein wird. Allerdings liegt nun auch mit dem FTK-Simulator ein Simulationswerkzeug vor, das bereits zum gegenwärtigen Zeitpunkt aufgrund seiner numerischen Leistungsfähigkeit grundsätzlich zu einer realitätsnahen Abbildung der geomechanischen Verhältnisse mit Blick auf das Bohrlochtragverhalten geeignet ist (3D-Konfiguration Strecke-Bohrloch). In Zukunft vorzunehmende Arbeiten können sich nunmehr auf die geomechanisch-geohydraulisch gekoppelte Modellierung und Simulation konzentrieren (geotektonische Charakteristika, physikalische Prozesse).

6.4.3.11 Weiteres Vorgehen

Wie den vorangehend in Abschnitt 6.4.3.9 erfolgten Ausführungen zu entnehmen ist, ist der im Rahmen dieses Vorhabens vorgenommene Ergebnisvergleich zwischen dem kommerziellen numerischen Simulator FLAC^{3D} und dem am LfD&G neu entwickelten FTK-Simulator für den Bereich der Simulation des geomechanisch-geohydraulisch gekoppelten Gebirgsver-



haltens unter der Voraussetzung eines jederzeit vollständig wassergefüllten Porenraumes (Einhassenfluss) erfolgreich abgeschlossen worden. Damit ist ein wichtiger Schritt zur Validierung des neu entwickelten FTK-Simulators erbracht worden.

Zur weiteren Validierung des FTK-Simulators ist es erforderlich, Simulationsergebnisse mit aus in situ-Experimenten gewonnenen Messdaten zu vergleichen. Messdaten zur Validierung des FTK-Simulators könnten unter anderem aus Datensätzen entnommen werden, wie sie im Rahmen von internationalen Projekten wie beispielsweise DECOVALEX-THMC gewonnen werden.

Ein weiteres Experiment, aus dem Datensätze zum Bohrlochtrag- und -deformationsverhalten sowie bezüglich des zeitabhängigen Porenwasserdruckabbaus in der Umgebung von Observationsbohrlöchern zur Validierung des FTK-Simulators gewonnen worden sind, ist das in Abschnitt 3.1 und Abschnitt 7 des vorliegenden Berichts beschriebene, zwischen Oktober 2012 und Juli 2014 von der GRS Braunschweig in Kooperation mit dem LfD&G im URL Mont Terri durchgeführte DMB-Experiment. Neben der weiteren Validierung des FTK-Simulators insbesondere im Bereich des Zweiphasenflusses anhand des Abgleichs von Simulationsergebnissen mit in situ-Messdaten ist im Rahmen des DMB-Experiments auch ein Ergebnisvergleich zwischen am LfD&G mit dem FTK-Simulator generierten Simulationsergebnissen und bei der GRS Braunschweig mit dem Simulator CODE_BRIGHT berechneten Simulationsergebnissen vorgenommen worden. Ausgewählte Berechnungsergebnisse, die mit dem FTK-Simulator sowie mit dem Simulator CODE_BRIGHT im Rahmen der numerischen Simulationsarbeiten zum DMB-Experiment generiert worden sind, werden nachfolgend in Abschnitt 7 dargestellt und diskutiert.

Parallel zu den durchzuführenden weiteren Validierungsarbeiten ist der FTK-Simulator weiter zu entwickeln, um die im Rahmen der durchgeführten numerischen Simulationsarbeiten als notwendig identifizierten Erweiterungen in den Programmcode zu integrieren. Die identifizierten notwendigen Erweiterungen werden abschließend noch einmal explizit aufgelistet:

- (1) Entwicklung einer Programmroutine, die es erlaubt, nicht *Voronoi*-artige Diskretisierungsstrukturen programmintern derart zu verarbeiten, dass sie im Anschluss eine Strömungssimulation mit dem FTK-Simulator ermöglichen, die nicht zu diskretisierungsbedingten Differenzen zwischen der mit dem FTK-Simulator und der mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdruckverteilung führt.



- (2) Erweiterung des FTK-Simulators um ein optional einsetzbares Kriterium zur Steuerung des hydraulischen Zeitschritts, sodass in Zukunft der erfahrene Anwender die Zeitschrittsteuerung individuell an gegebene Erfordernisse anpassen kann, aber gleichzeitig auch der im Umgang mit dem FTK-Simulator noch unerfahrenere Anwender die Möglichkeit zur sicheren Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen erhält.
- (3) Integration einer Option zur Berücksichtigung einer hydraulischen Anisotropie in den FTK-Simulator, da den vorangehenden Ausführungen in Abschnitt 6.4.3.10 zu entnehmen ist, dass die Berücksichtigung der schichtungsgefügebedingten Anisotropie bezüglich der hydraulischen Leitfähigkeit zur realitätsnäheren Abbildung von Porenwasserdruckabsenktrichtern im Gebirge sowie von entsättigten Gebirgsbereichen in der Umgebung von untertägigen Hohlräumen in Tongesteinsformationen aufgrund des stets vorhandenen Schichtflächengefüges zwingend erforderlich ist.

Neben den beschriebenen vorzunehmenden Optimierungen und Erweiterungen des FTK-Simulators ist in Zukunft eine schrittweise Annäherung an komplexere Aufgabenstellungen, wie sie im Rahmen dieses Vorhabens für den Bereich des Einphasenflusses bereits sehr ausführlich und für den Bereich des Zweiphasenflusses in einer ersten Annäherung an die Thematik in Abschnitt 7 erfolgt ist, auch für den Bereich des Zwei- oder Mehrphasenflusses ausführlich vertiefend vorzunehmen. Insbesondere für das deutlich komplexere Aufgabenfeld der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulation von Gebirgstrag- und Gebirgsdeformationsverhalten unter der Annahme der Ausbildung eines Zwei- oder Mehrphasenflusses in den Porenräumen des Gebirges empfiehlt sich eine umsichtige Vorgehensweise, bei der die Komplexität der numerisch abzubildenden Prozesse ausgehend von einer möglichst einfachen Aufgabenstellung nur schrittweise gesteigert werden sollte.





7 SCHWERPUNKT „BENCHMARKING“: Rechnerische Simulationen zum DMB-Experiment (Mine-by-Test) im URL Mont Terri mit den Simulatoren FTK und CODE_ BRIGHT

7.1 Vorbemerkungen

Der Aufbau des DMB-Experimentes zur Durchführung der Porenwasserdruckmessungen in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 wird im nachfolgenden Abschnitt 7.2 zunächst kurz beschrieben, wobei der Schwerpunkt der Ausführungen im Hinblick auf die nachfolgend vorgestellten hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen auf die Positionierung der Porenwasserdruckaufnehmer gegenüber dem Observationsbohrloch DMB-B1 gelegt wird. Darauf folgend werden in Abschnitt 7.3 die vom LfD&G und von der GRS zur Durchführung der numerischen Simulationen verwendeten numerischen Modelle und die Berechnungsgrundlagen erläutert. In Abschnitt 7.4 erfolgt dann eine Gegenüberstellung der mittels des FTK-Simulators ermittelten Porenwasserdrücke im Gebirge in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 mit den in situ im Rahmen des DMB-Experimentes gemessenen Porenwasserdrücken, bevor in Abschnitt 7.5 die numerisch mittels des FTK-Simulators ermittelte zeitabhängige Entwicklung weiterer hydraulischer Zustandsgrößen in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 aufgezeigt wird. In Abschnitt 7.6 erfolgt schließlich die Gegenüberstellung von ausgewählten hydraulischen und mechanischen Zustandsgrößen, die mittels der zwei unterschiedlichen Simulatoren FTK und CODE_
BRIGHT generiert worden sind, bevor abschließend in Abschnitt 7.7 ein Fazit bezüglich der durchgeführten Berechnungen und insbesondere bezüglich der Gegenüberstellung der Berechnungsergebnisse der beiden unterschiedlichen numerischen Simulatoren FTK und CODE_
BRIGHT gezogen wird.

7.2 Aufbau und Ablauf des in situ-Experimentes

Im Januar 2013 sind im URL Mt. Terri im Rahmen des von der GRS und dem LfD&G gemeinsam durchgeführten DMB-Experimentes vier unterschiedlich orientierte Observationsbohrlöcher mit der Bezeichnung DMB-B1 bis DMB-B4 abgeteuft worden. Die Ergebnisse der in diesen Observationsbohrlöchern in den folgenden acht Monaten vom LfD&G durchgeführten Observationsarbeiten können Abschnitt 3.1 entnommen werden. Neben den in Abschnitt 3.1 beschriebenen Observationsarbeiten sind im Gebirge in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 von der GRS in speziell abgeteuften Messbohrlöchern kontinuierliche



Der kombinierten Betrachtung der Darstellungen in Bild 7.1 und Bild 7.2 kann entnommen werden, dass bedingt durch die unterschiedlichen Neigungen der Bohrlochlängsachsen der von der Gallery 98 aus abgeteufte Bohrlöcher DMB-B5 bis DMB-B8 die Endbereiche der Bohrlöcher, in denen die Porenwasserdruckaufnehmer installiert worden sind, sich innerhalb derselben vertikalen Ebene in Abständen von $d \approx 0,5$ m (DMB-B5) in horizontaler Richtung bzw. in Abständen von $d \approx 1,0$ m (DMB-B6), $d \approx 2,0$ m (DMB-B7) und $d \approx 4,0$ m (DMB-B8) in vertikaler Richtung zur Kontur des Observationsbohrlochs DMB-B1 befinden.

Um vor dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 eine Equilibrierung der durch den Bohrvorgang gestörten Porenwasserdrücke im Gebirge sowie einen hydraulischen Kraftschluss zwischen dem Porenwasser des Opalinustons und dem hydraulischen Kreislauf in den Porenwasserdruckaufnehmern zu ermöglichen, sind die Porenwasserdruckaufnehmer bereits $\Delta t \approx 4$ Monate vor dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 im Gebirge installiert worden. Neben den Porenwasserdruckmessungen vor, während und nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 sind mittels der installierten Porenwasserdruckaufnehmer $\Delta t \approx 6$ Wochen nach ihrer Installation zusätzlich auch Permeabilitätsmessungen in dem die Porenwasserdruckaufnehmer umgebenden Gebirge durchgeführt worden. Die Ergebnisse der Permeabilitätsmessungen sind bei der Durchführung der nachfolgend vorgestellten hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen berücksichtigt worden.

Im Rahmen des vorliegenden Berichtes wird auf eine detaillierte Beschreibung der Durchführung sowie auf eine detaillierte Diskussion der Ergebnisse der Porenwasserdruck- und Permeabilitätsmessungen verzichtet, da der wissenschaftliche Schwerpunkt zunächst auf die Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen mit der Ausbildung einer Teilsättigung des Porenraumes (Zweiphasenfluss) mit dem FTK-Simulator und darüber hinaus auf einen ersten Vergleich der mittels des FTK-Simulators generierten Simulationsergebnisse mit unter Verwendung des Simulators CODE_BRIGHT berechneten Simulationsergebnissen gelegt worden ist.

7.3 Berechnungsgrundlagen und Modellierung

7.3.1 Modellierung

(a) *Verwendete Modelle*

Für die Modellierung der insgesamt als komplex zu bezeichnenden gebirgsmechanischen Situation in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 mit der Nähe zur Gallery 98 und der Nähe zur Niche MI ist für die im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten numerischen Untersuchungen ein stark vereinfachender zweidimensionaler Modellierungsansatz gewählt worden, da der Schwerpunkt der numerischen Untersuchungen eher auf der Erkundung der grundsätzlichen Möglichkeiten des neu entwickelten FTK-Simulators im Bereich der Simulation des Zweiphasenflusses und auf dem Ergebnisvergleich mit den vom Simulator CODE_BRIGTH generierten Berechnungsergebnissen gelegen hat als auf der möglichst realitätsgetreuen Abbildung der vorliegenden gebirgsmechanischen Gesamtsituation. Dementsprechend sind bei der Erstellung der zwei Modelle jeweils nur das Observationsbohrloch DMB-B1 und die Gallery 98 modelliert worden. Ein in der Realität nicht auszuschließender geomechanischer und / oder geohydraulischer Einfluss der ebenfalls nahe gelegenen Niche MI auf die mechanischen und hydraulischen Zustandsgrößen im Gebirge in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 kann somit bei der Verwendung der beiden Modelle nicht numerisch abgebildet werden.

Bild 7.3 zeigt das vom LfD&G für die Berechnungen mittels des FTK-Simulators erstellte zweidimensionale Modell und in Bild 7.4 ist das von der GRS für die Berechnungen mit dem Simulator CODE_BRIGTH generierte zweidimensionale Modell zu ersehen. Programmtechnisch bedingt sind deutliche Unterschiede bezüglich der Modelldiskretisierungen bei dem Vergleich der beiden Modelle in Bild 7.3 und Bild 7.4 zu erkennen. Gemeinsam ist beiden Modellen jedoch, dass der für die Durchführung der numerischen Simulationen entscheidende Gebirgsbereich in der Umgebung des Observationsbohrlochs, in dem sich auch die Porenwasserdrucksensoren befinden, deutlich feiner diskretisiert worden ist als der restliche Modellbereich. Bezüglich der Modellgeometrien unterscheiden sich die Modelle lediglich dadurch, dass im Modell des LfD&G auch die unteren Eckbereiche der Streckenkontur aus modellierungstechnischen Gründen ausgerundet worden sind, während sie im Modell der GRS rechteckig und damit realitätsnäher abgebildet worden sind. Die auf die Unterschiede bezüglich der Modellierung der Streckenkontur zurückzuführenden Ergebnisdifferenzen sind jedoch insbe-

sondere im hier primär betrachteten Bohrlochumfeld aufgrund des Abstands der Bohrlochkontur zur Streckenkontur von $d = 10$ m als vernachlässigbar zu betrachten.

Die davon abgesehen für beide zum Einsatz gekommenen Modelle vollständig identische Modellgeometrie wird im nächsten Abschnitt vorgestellt.

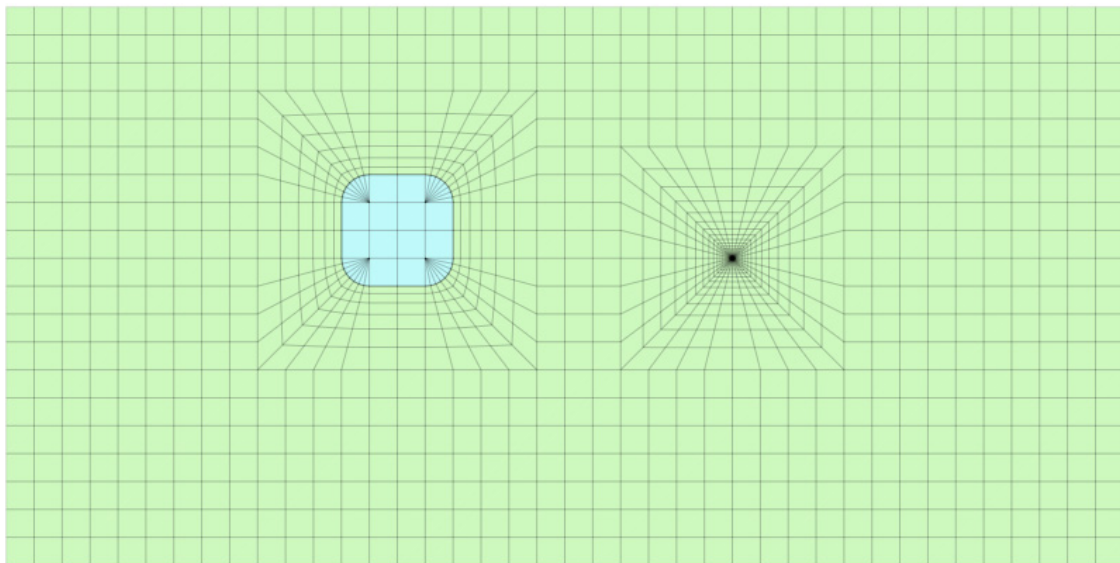


Bild 7.3: Mittels des Programms $FLAC^{3D}$ erstelltes zweidimensionales Bohrloch-Strecken-Modell des LfD&G zur Durchführung der Berechnungen mit dem FTK-Simulator

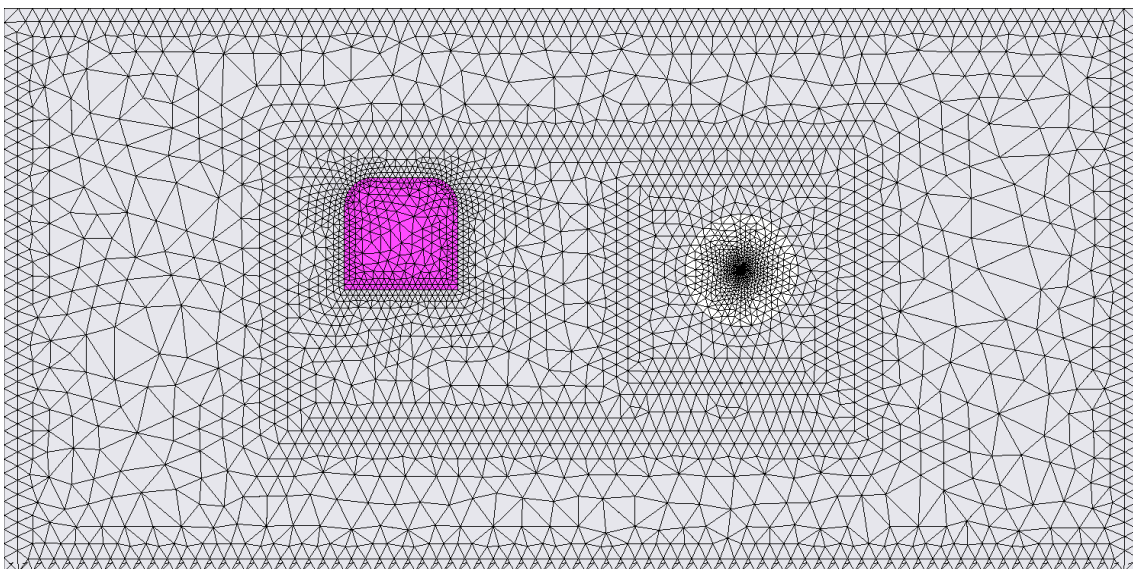


Bild 7.4: Zweidimensionales Bohrloch-Strecken-Modell der GRS zur Durchführung der Berechnungen mit dem Simulator `CODE_BRIGIT`



(b) *Modellgeometrie*

Das nachfolgend analysierte Observationsbohrloch hat einen Anfangsdurchmesser von $d_{BL} = 101$ mm. Die Breite und die Höhe der Strecke betragen beide je $b_s = 4$ m und $h_s = 4$ m. Die Ausrundungen in den Eckbereichen der Streckenkontur haben einen Radius von $r = 1$ m und die äußeren Abmessungen des Modells betragen $b_M = 40$ m und $h_M = 20$ m. In beiden Modellen sind das Observationsbohrloch und die Strecke genau identisch angeordnet und der Abstand zwischen der Streckenkontur und der Bohrlochkontur beträgt in Annäherung an die Situation innerhalb des URL Mont Terri $d = 10$ m.

In beiden Fällen sind die seitlichen Berandungsflächen der Modelle abgesehen von der oberen horizontalen Berandungsfläche in der jeweiligen Normalenrichtung unverschieblich gelagert. Die primären Gebirgsspannungskomponenten verlaufen jeweils in Normalenrichtung der jeweiligen Berandungsfläche.

7.3.2 Berechnungsgrundlagen

(a) *Vorbermerkungen*

Die Berechnungsgrundlagen können, soweit sie nachfolgend nicht erneut explizit als *ergänzende Anmerkung* aufgeführt werden, Abschnitt 6.4.3.3 entnommen werden.

Für die nachfolgend vorgestellten Berechnungen ist, wie auch schon bei der Erstellung der in Abschnitt 6.4.3 vorgestellten numerischen Berechnungen, vereinfachend von einem linear-elastischen Materialverhalten des Opalinustons ausgegangen worden. Der Aufbau des Tonsteingebirges ist weiter für den Untersuchungsbereich als homogen und bezüglich der mechanischen Eigenschaften auch als isotrop angenommen worden, sodass den Berechnungen das Stoffmodell nach Hooke zugrunde gelegt werden kann unter Einbeziehung der beiden Materialkennwerte Verformungsmodul E_v und Poissonzahl ν .

(b) *Ergänzende Anmerkungen zu den Gebirgsverhältnissen*

Für die hier durchgeführten Benchmark-Berechnungen ist in Absprache mit dem Projektpartner GRS vereinfachend, abweichend von den Berechnungen in Abschnitt 6.4.3, ein isotroper Primärspannungszustand von $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = 4,0$ MPa angenommen worden. Die initiale Gebirgstemperatur beträgt $T = 14$ °C.

(c) *Ergänzende Anmerkungen zu den mechanischen Gebirgseigenschaften*

Ebenfalls in Absprache mit dem Projektpartner GRS sind, abweichend von den Berechnungen in Abschnitt 6.4.3, der Verformungsmodul zu $E_v = 3000$ MPa und die Poissonzahl zu $\nu = 0,29$ angenommen worden.

(d) *Ergänzende Anmerkungen zu den hydraulischen (Gebirgs-)Eigenschaften*

Für Gebirgsbereiche, in denen sich eine Teilsättigung des Porenraumes (Zweiphasenfluss) ausbildet, werden die Beziehungen für Relativpermeabilitäten nach *Irmay (1954)*, Gleichung (6.1), und für Kapillarspannungen nach *van Genuchten (1980)*, Gleichung (5.25), verwendet, die in Gleichung (7.1) bzw. Gleichung (7.2) wiedergegeben werden:

$$K_{rel;l} = A \cdot S_{l;eff}^\lambda ; \quad K_{rel;g} = A - K_{rel;l} \quad \text{mit } A=1 \quad \text{und } \lambda=3 \quad (7.1)$$

$$p_{cap}(S_{l;eff}) = \frac{\gamma_l}{\alpha} \left(S_{l;eff}^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{1-m} \quad (7.2)$$

Im Gegensatz zu den Berechnungen zum Einphasenfluss in Abschnitt 6.4.3 wird für die nachfolgend vorgestellten Berechnungen von einer hydraulischen Transversalisotropie des Opalinustons ausgegangen, wobei schichtungparallel höhere Permeabilitäten vorliegen als schichtungorthogonal. Der Verlauf der Schichtflächen innerhalb der Modellierungsebene kann Bild 7.5 entnommen werden.

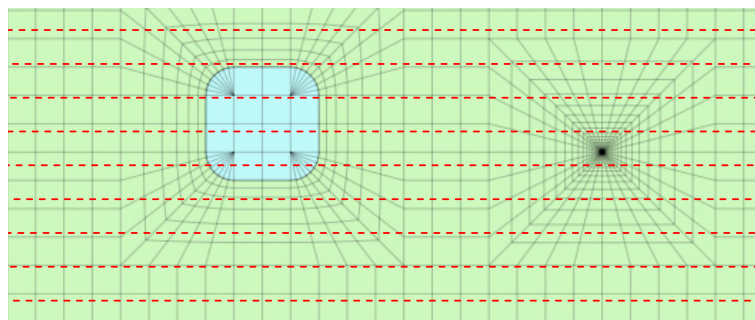


Bild 7.5: Visualisierung des Verlaufs der unter $\alpha = 45^\circ$ aus Richtung Norden einfallenden Schichtflächen (rot gestrichelte Linien) in der zweidimensionalen Modellierungsebene

Die Betrachtung von Bild 7.5 zeigt, dass in horizontaler Richtung und somit zwischen der Strecke und dem Observationsbohrloch eine höhere Permeabilität des Gesteins vorliegt und dass die Gebirgspermeabilität in vertikaler Richtung geringer ist. Während im Simulator CO-



DE_BRIGTH eine hydraulische Anisotropie direkt berücksichtigt werden kann, ist die Möglichkeit zur Berücksichtigung einer hydraulischen Anisotropie zum Zeitpunkt der Durchführung der hier betrachteten Berechnungen in dem gerade neu entwickelten FTK-Simulator noch nicht implementiert gewesen. Um in einer ersten Annäherung an die Simulation einer hydraulisch transversal-isotropen Situation dennoch die zwei unterschiedlichen Permeabilitäten bei den numerischen Berechnungen mit dem FTK-Simulator angenähert realitätsnah zu berücksichtigen, ist für die Simulation der Strömungsphase nach dem Ausbruch der Strecke der höhere Permeabilitätswert von $K_1 = 2 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ angenommen worden. Somit ist für die Ermittlung der hydraulischen Beeinflussung des Gebirges aus der Strecke heraus in die Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 der an der lateralen Strömung ausgerichtete Ansatz gewählt worden.

Um den hydraulischen Einfluss des Observationsbohrlochs auf die in seiner Umgebung vornehmlich vertikal und somit hydraulisch gesehen senkrecht zur Schichtung positionierten Porenwasserdruckaufnehmer nicht zu überschätzen, ist nach der Simulation des Abteufens des Observationsbohrlochs für die weitere Strömungs- / Entsättigungssimulation der kleinere der beiden nachfolgend angegebenen Permeabilitätswerte von $K_2 = 5 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$ verwendet worden. Dadurch ist berücksichtigt worden, dass drei der vier Porenwasserdruckaufnehmer vertikal unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 positioniert sind.

Parameter	Einheit	Symbol	Zahlenwert
Ausgangsporosität	-	ϕ_0	0.137
Permeabilität //	m^2	K_1	2,0E-19
Permeabilität \perp	m^2	K_2	5,0E-20
Relativpermeabilität – Irmay 1	-	λ	3
Relativpermeabilität – Irmay 2	-	A	1
Kapillardruckfunktion – Van Genuchten 1	MPa	P_0	12
Kapillardruckfunktion – Van Genuchten 2	-	β	0,3
Kapillardruckfunktion – Van Genuchten 3	-	$SI_r - SI_s$	0,01 – 1,0
Biotkoeffizient	-	b	1,0

Tabelle 7.1: Zusammenstellung der Parameter zur Beschreibung der hydraulischen Gebirgseigenschaften

Die für die rechnerischen Simulationen verwendeten hydraulischen Parameter sind in Abstimmung mit dem Projektpartner GRS der Veröffentlichung *Czaikowski et al. (2014)* entnommen worden. Sie werden in der vorstehenden Tabelle 7.1 zusammengefasst.

(e) *Berechnungsdurchführung*

Ausgehend von einem isotropen Primärspannungszustand von $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = 4,0$ MPa, einem initialen Porenwasserdruck von $PP_i = 2,0$ MPa und einem initialen Sättigungsgrad von $S_i = 1$ wird zunächst die Strömungs- / Entsättigungsphase nach dem Streckenausbruch simuliert. Zur Simulation der Ausbildung eines ent- bzw. teilgesättigten Gebirgsbereichs um die Strecke herum wird über einen Zeitraum von $\Delta t = 15$ a ein negativer Porenwasserdruck von $PP_s = -5$ MPa als Randbedingung an der Streckenkontur angesetzt, *Czaikowski et al. (2014)*. Im Simulator CODE_BRIGHT wird dieser Zahlenwert direkt als Randbedingung aufgebracht, während bei der Verwendung des FTK-Simulators ein gemäß Gleichung (7.2) nach *van Genuchten* ermittelter Sättigungsgrad von $S_{str} = 0,9262$ als hydraulische Randbedingung an der Streckenkontur festgelegt wird.

Gemäß der Kapillardruckfunktion nach *van Genuchten* führt der angegebene Sättigungsgrad zum Auftreten von negativen Porenwasserdrücken mit einem Zahlenwert von $PP_{str} = -5$ MPa. Im Anschluss an die $\Delta t = 15$ a lang andauernde Entsättigungsphase um die Gallery 98 herum wird das Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 simuliert. Für weitere $\Delta t = 487$ d wirkt an der Streckenkontur nun weiterhin ein negativer Porenwasserdruck von $PP_{str} = -5$ MPa während an der Kontur des wesentlich weniger stark bewetterten Observationsbohrlochs ebenfalls *Czaikowski et al. (2014)* folgend ein negativer Porenwasserdruck von $PP_{BL} = -1$ MPa als Randbedingung angesetzt wird, der gemäß Gleichung (7.2) nach *van Genuchten* bei einem Sättigungsgrad des Porenraums des Gesteins von $S_{BL} = 0,9904$ erreicht wird.

7.4 Gegenüberstellung der mit dem FTK-Simulator berechneten Porenwasserdrücke mit den in situ gemessenen Porenwasserdrücken

Nachstehend werden zunächst die Messergebnisse der Porenwasserdruckaufnehmer, die innerhalb der Bohrlöcher DMB-B5 bis DMB-B8 in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 installiert worden sind, mit den Berechnungsergebnissen verglichen, die mittels des FTK-Simulators berechnet worden sind.

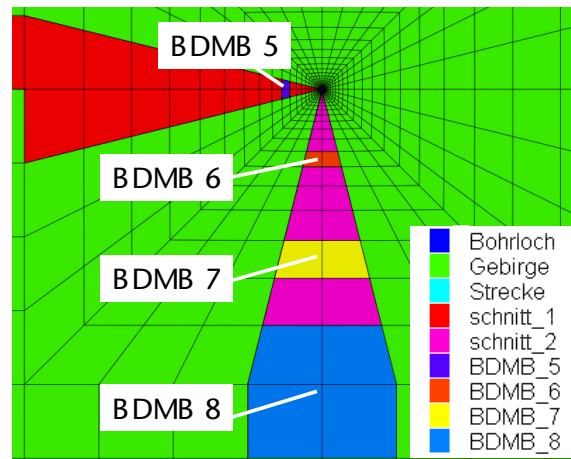


Bild 7.6: Detailausschnitt des zweidimensionalen Bohrloch-Strecken-Modells aus Bild 7.3 mit einer Darstellung der Diskretisierung in der Umgebung des Bohrlochs mit einer farblichen Hervorhebung des Horizontalschnitts (Schnitt 1 / rot) und des Vertikalschnitts (Schnitt 2 / violett) und einer farblichen Hervorhebung der Zonen des Modells, aus denen die berechneten Porenwasserdrücke zur Gegenüberstellung mit den in situ von den Porenwasserdruckaufnehmern in den Bohrlochern DMB-B5 bis DMB-B8 gemessenen Porenwasserdrücken herangezogen worden sind

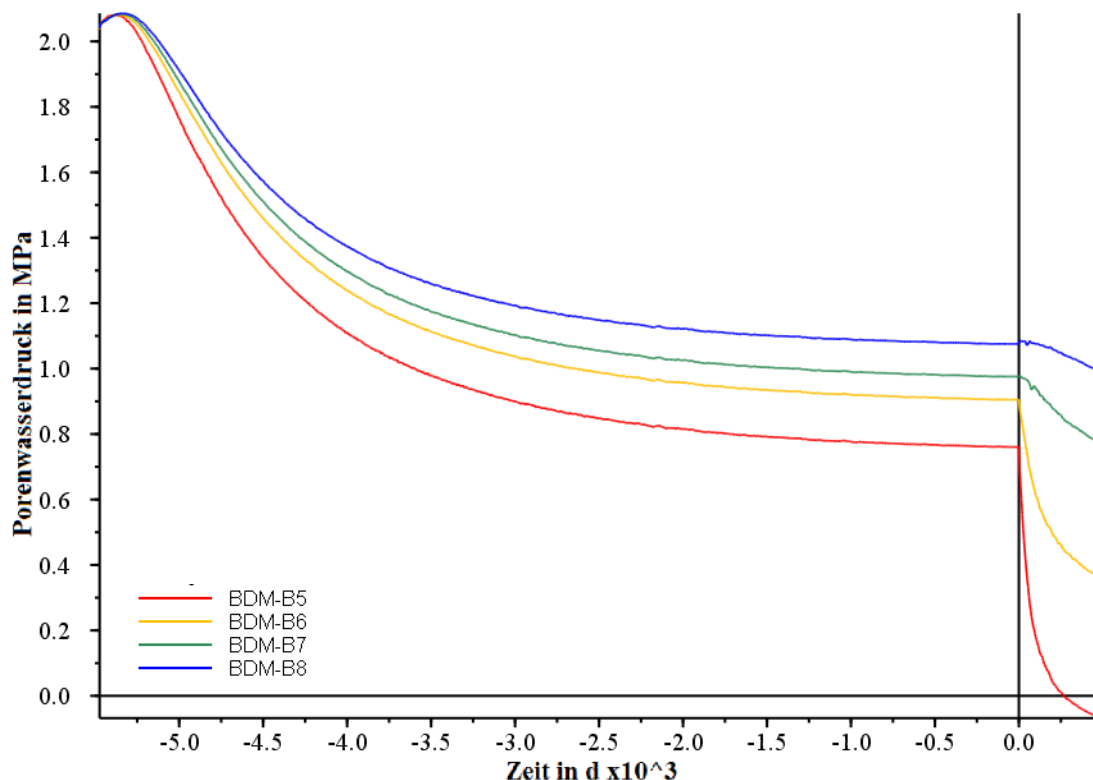


Bild 7.7: Zeitabhängige Entwicklung der mittels des FTK-Simulators an den Stellen im Gebirge, an denen die Porenwasserdruckaufnehmer installiert worden sind, berechneten Porenwasserdrücke für den Zeitraum von $\Delta t = 15$ a vor dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 (x-Achsenabschnitt mit negativen Zahlenwerten beginnend bei $t = -5479$ d) und für den Zeitraum von $\Delta t = 487$ d nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1

Bei der Verwendung des FTK-Simulators zur Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen werden die Porenwasserdrücke in den Schwerpunkten der einzelnen Zonen des diskretisierten Modells berechnet. Bild 7.6 zeigt einen Detailausschnitt aus dem zweidimensionalen Bohrloch-Strecken-Modell des LfD&G, in dem diejenigen Zonen farblich gekennzeichnet worden sind, deren ermittelte Porenwasserdrücke zum Vergleich der Berechnungsergebnisse mit den in situ gemessenen Porenwasserdrücken herangezogen worden sind.

Für den Vergleich der im Rahmen der numerischen Simulation mittels des FTK-Simulators generierten Porenwasserdrücke mit den mittels des Porenwasserdruckaufnehmers im Bohrloch DMB-B5 in situ gemessenen Porenwasserdrücken sind die numerisch in den Schwerpunkten der beiden in Bild 7.6 in Dunkelblau dargestellten Zonen ermittelten Porenwasserdrücke herangezogen und gemittelt worden. Für den Vergleich mit den in situ innerhalb des Bohrlochs DMB-B6 gemessenen Porenwasserdrücken werden die gemittelten Simulationsergebnisse aus den zwei in Bild 7.6 rot gekennzeichneten Zonen verwendet, während die Simulationsergebnisse aus den gelb gekennzeichneten Zonen mit den Messergebnissen des innerhalb des Bohrlochs DMB-B7 platzierten Porenwasserdruckaufnehmers verglichen werden und der Mittelwert der für die vier in Bild 7.6 in hellem Blau dargestellten Zonen ermittelten Porenwasserdrücke den von dem im Bohrloch DMB-B8 installierten Porenwasserdruckaufnehmer gemessenen Porenwasserdrücken gegenübergestellt wird.

Des Weiteren sind zwei Schnitte durch das Gebirge farblich in Rot (Horizontalschnitt zwischen Bohrloch- und Streckenkontur) bzw. in Violett (Vertikalschnitt unterhalb des Observationsbohrlochs) gekennzeichnet. Die beiden farblich gekennzeichneten Schnitte werden im Rahmen des vorliegenden Abschnitts 7.4 zunächst nicht betrachtet, sondern ausgewählte ermittelte Zustandsgrößen entlang der beiden Schnitte werden in den nachfolgenden zwei Abschnitten 7.5 und 7.6 im Rahmen der Vorstellung weiterer mittels des FTK-Simulators generierter Simulationsergebnisse sowie im Rahmen der Gegenüberstellung von Simulationsergebnissen des FTK-Simulators mit mittels des Simulators CODE_BRIGHT generierten Berechnungsergebnissen betrachtet.

Bild 7.7 zeigt zunächst die mittels des FTK-Simulators berechnete zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdrücke an den vier in Bild 7.6 farblich gekennzeichneten Positionen über den gesamten Simulationszeitraum hinweg – beginnend mit der Simulation des Ausbruchs der Gallery 98.



Der Betrachtung des Diagramms in Bild 7.7 kann entnommen werden, wie die Porenwasserdrücke an den vier Lokationen, an denen die Porenwasserdruckaufnehmer installiert worden sind, unmittelbar nach dem Ausbruch der Gallery 98 etwas über den vorgegebenen initialen Porenwasserdruck von $P_i = 2,0$ MPa hinaus ansteigen und danach sogar noch kurze Zeit geringfügig weiter anwachsen, bevor die Porenwasserdrücke bedingt durch den Ausbruch der Gallery 98 und das durch den entlang der Wände der Gallery 98 zur Berücksichtigung von Ventilationseffekten angesetzten negativen Porenwasserdruck von $P_s = -5,0$ MPa hervorgerufene Porenwasserdruckgefälle und die damit einhergehende hydraulische Strömung in Richtung der Strecke abzusinken beginnen.

Der initiale Anstieg der Porenwasserdrücke über das Ausgangsniveau von $P_i = 2$ MPa hinaus ist den ausbruchsbedingten Spannungsumlagerungen zuzuschreiben, die eine Kompaktion des Gesteins in der Umgebung der Strecke und somit auch eine Verringerung des Porenvolumens hervorrufen. Im Anschluss an den Ausbruch des Streckenquerschnitts führt die einsetzende hydraulische Strömung zunächst vorwiegend in der näheren Umgebung der Streckenkontur zu einem Abbau des Porenwasserdrucks, wodurch weitere Umlagerungen der mechanischen Spannungen von der Kontur in die weiter von der Streckenkontur entfernt gelegenen Gebirgsbereiche hervorgerufen werden. Die Spannungsumlagerungen tiefer in das Gebirge hinein führen zu einer stärkeren mechanischen Belastung des Gebirges im Bereich der Porenwasserdruckaufnehmer, wodurch eine weitere Kompaktion des Gebirges einhergehend mit einer Verringerung des Porenraumes und mit einem vorübergehenden weiteren Anstieg der Porenwasserdrücke bewirkt wird. Im Anschluss an die durch die Spannungsumlagerungen hervorgerufene vorübergehende Porenwasserdruckerhöhung beginnt der durch das hydraulische Potenzialgefälle zwischen der Strecke und dem tiefer im Gebirge gelegenen Bereich, in dem die vier Porenwasserdrucksensoren installiert worden sind, bedingte Porenwasserdruckabbau.

Es zeigt sich bei der Betrachtung von Bild 7.7, wie der Porenwasserdruckabbau innerhalb des $\Delta t = 15$ a lang andauernden Simulationszeitraums zwischen dem Streckenausbruch und dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 an allen vier betrachteten Lokationen im Gebirge zunächst relativ schnell voranschreitet, sich kontinuierlich verlangsamt und gegen Ende des simulierten Strömungszeitraums von $\Delta t = 15$ a nahezu stagniert – zu entnehmen aus dem beinahe horizontalen Verlauf der vier Zahlenwertegraphen kurz vor der Simulation des Bohrlochabteufens.

Nach Ablauf der ersten $\Delta t = 15$ a (5479 d) erfolgt zum Zeitpunkt $t = 0$ d die Simulation des Abteufens des Observationsbohrlochs DMB-B1. Aus den unterschiedlichen Verläufen der vier Porenwasserdruckgraphen im Diagramm in Bild 7.7 kann in Verbindung mit der Darstellung der Positionierung der Porenwasserdruckaufnehmer in Bild 7.6 geschlussfolgert werden, dass innerhalb der ersten $\Delta t = 15$ a ein um so stärkerer Porenwasserdruckabbau im Porenraum des Gebirges erfolgt, je näher der betrachtete Gebirgsbereich an der Streckenkontur liegt.

In Bild 7.8 wird die bereits in Bild 7.7 zu betrachtende Entwicklung der Porenwasserdrücke vom Zeitpunkt des Abteufens des Observationsbohrlochs DMB-B1 bis zum Ende des Simulationszeitraums zum Zeitpunkt $t = 487$ d vergrößert dargestellt. Erwartungsgemäß ist der durch das Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 bedingte Porenwasserdruckabbau umso stärker ausgeprägt, je näher sich der betrachtete Porenwasserdruckaufnehmer an der Kontur des Observationsbohrlochs befindet. Daher fallen die Porenwasserdrücke in den $d \approx 4$ m, $d \approx 2$ m und $d \approx 1$ m von der Kontur des Observationsbohrlochs entfernt liegenden Porenwasserdruckaufnehmern, die innerhalb der Bohrlöcher DMB-B8, DMB-B7 und DMB-B6 installiert worden sind, auch innerhalb des simulierten Zeitraumes auf positive Porenwasserdruck

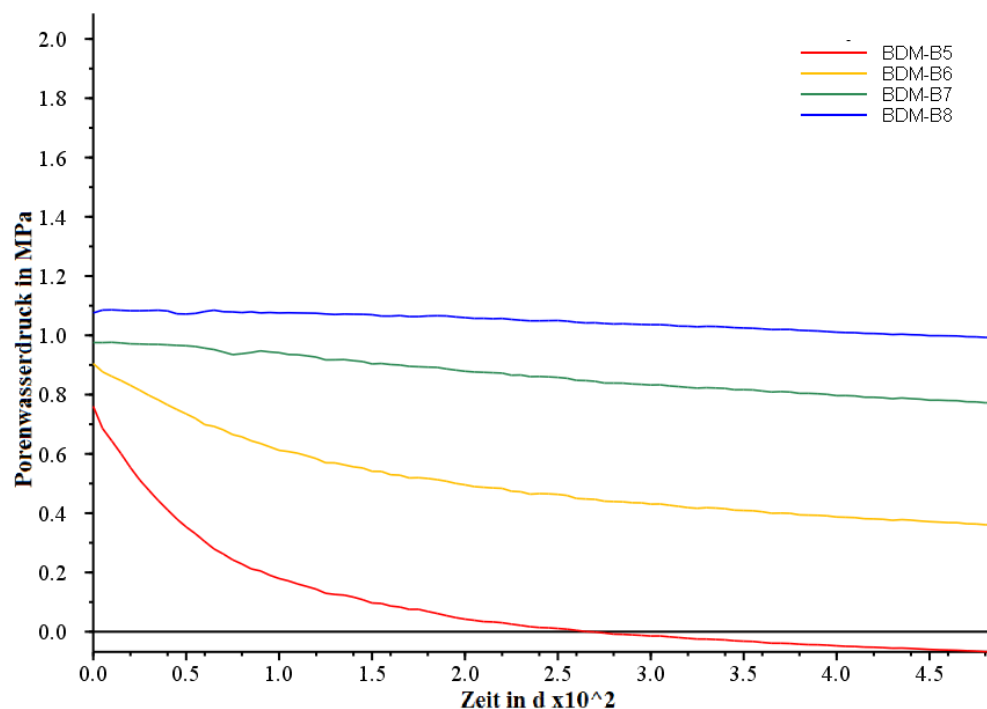


Bild 7.8: Mittels des FTK-Simulators an den Stellen im Gebirge, an denen die Porenwasserdruckaufnehmer installiert worden sind, berechnete Porenwasserdrücke für einen Zeitraum von $\Delta t = 487$ t nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1



werte von $PP \approx 1,0$ MPa, $0,9$ MPa und $0,4$ MPa ab, während für den innerhalb des Bohrlochs DMB-B5 in einer Entfernung von nur $d \approx 0,5$ m installierten Porenwasserdruckaufnehmer von dem Simulationszeitpunkt $t = 260$ d nach der Simulation des Abteufens des Observationsbohrlochs DMB-B1 an Porenwasserdruckwerte von $PP < 0$ MPa berechnet werden. Das bedeutet, dass der am nächsten an der Bohrlochkontur positionierte Porenwasserdruckaufnehmer sich von diesem Simulationszeitpunkt an im Bereich der sich zeitabhängig um das Observationsbohrloch herum ausweitenden teilgesättigten Gebirgszone befindet. Zum Ende des Simulationszeitraums $t = 487$ d nach der Simulation des Abteufens des Observationsbohrlochs DMB-B1 wird für den in einer Entfernung von $d \approx 0,5$ m zur Bohrlochkontur installierten Porenwasserdruckaufnehmer ein negativer Porenwasserdruck von $PP \approx -0,05$ MPa berechnet.

Der Vergleich der in Bild 7.8 dargestellten Ergebnisse der numerischen Simulation mit den in Bild 7.9 dargestellten in situ-Messwerten der Porenwasserdruckaufnehmer verdeutlicht, dass die numerisch ermittelten zeitabhängigen Entwicklungen der Porenwasserdrücke zwar plausibel erscheinen, aber dass sie die in situ nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 abgelaufene Entwicklung nur eingeschränkt widerspiegeln. Während im Rahmen der numerischen Simulation für alle vier Porenwasserdruckaufnehmer nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 ein anhaltender, zunächst stärker ausgeprägter und im weiteren Verlauf des Simulationszeitraums nachlassender Porenwasserdruckabbau über den gesamten Simulationszeitraum hinweg ermittelt worden ist, der umso stärker ausgeprägt auftritt, je näher sich der betrachtete Porenwasserdruckaufnehmer an der Kontur des Observationsbohrlochs DMB-B1 befindet, ist eine derartig klar erkennbare Systematik bezüglich der zeitabhängigen Entwicklung der Porenwasserdrücke im Zeitraum nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 in situ nicht zu identifizieren gewesen. Wie der Betrachtung von Bild 7.9 zu entnehmen ist, hat lediglich der innerhalb des Bohrlochs DMB-B6 in einer Entfernung von $d \approx 1,0$ m zur Kontur des Observationsbohrlochs DMB-B1 installierte Porenwasserdruckaufnehmer eine unmittelbar mit dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 zwischen dem 17.01.2013 und dem 21.01.2013 korrelierbare Reaktion des Porenwasserdrucks im Gebirge aufzeichnen können.

Deutlich ist bei der Betrachtung des Diagramms in Bild 7.9 zu erkennen, wie der gelbe Messwertgraph des Porenwasserdruckaufnehmers im Bohrloch DMB-B6 einen einige Tage nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 beginnenden und ca. einen Monat

lang andauernden Abfall des Porenwasserdrucks von $PP \approx 0,37$ MPa auf $PP \approx 0,30$ MPa beschreibt. Während im Rahmen der numerischen Simulation für den innerhalb des Bohrlochs DMB-B6 installierten Porenwasserdruckaufnehmer ein über den gesamten Observationszeitraum hinweg anhaltender Porenwasserdruckabbau von anfänglich $PP \approx 0,9$ MPa auf schließlich $PP \approx 0,4$ MPa berechnet worden ist, verbleibt der in situ gemessene Porenwasserdruck nach dem beschriebenen Porenwasserdruckabfall über einen Zeitraum von $\Delta t > 1$ a bis zum Ende des Observationszeitraums nahezu konstant. Wie der Betrachtung des Messwertdiagramms in Bild 7.9 weiter zu entnehmen ist, hat sich in situ für keinen der drei weiteren Porenwasserdruckaufnehmer in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 ein durch das Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 hervorgerufener Abbau des Porenwasserdrucks feststellen lassen.

Während der innerhalb des Bohrlochs DMB-B5 in einer Entfernung von $d \approx 0,5$ m vom Observationsbohrloch DMB-B1 installierte Porenwasserdruckaufnehmer auf Basis der numerischen Berechnungsergebnisse als der am stärksten von einer Absenkung des Porenwasser-

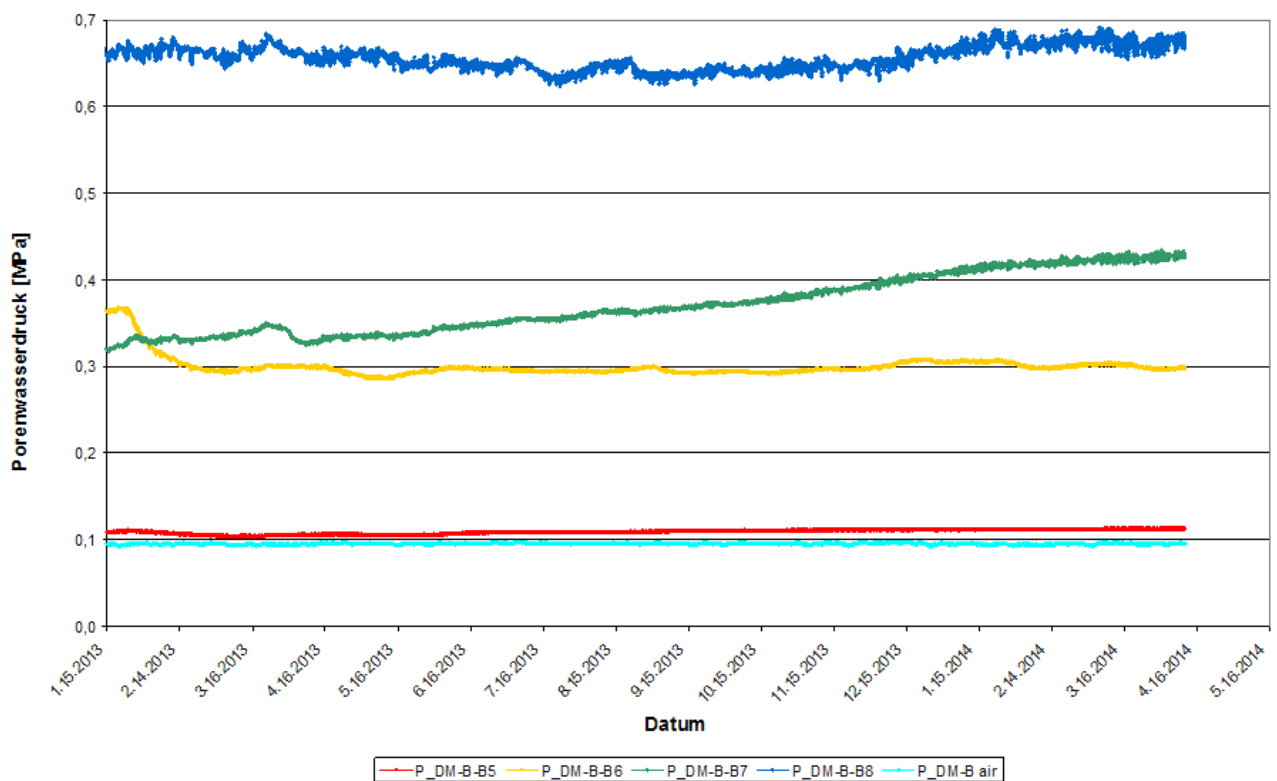


Bild 7.9: Von den vier innerhalb der Bohrlöcher DMB-B5 bis DMB-B8 zwischen dem 15.01.2013 und dem 11.04.2014 gemessene Porenwasserdrücke sowie der außerhalb der Bohrlöcher in der Gallery 98 gemessene Luftdruck

drucks betroffene Porenwasserdruckaufnehmer einzuschätzen gewesen ist, ist in situ keine Absenkung des Porenwasserdrucks anhand der Messergebnisse des innerhalb des Bohrlochs DMB-B5 installierten Porenwasserdruckaufnehmers innerhalb des ca. 15-monatigen Observationszeitraums festzustellen gewesen. Interessanterweise liegt der vom innerhalb des Bohrlochs DMB-B5 installierten Porenwasserdruckaufnehmer gemessene Porenwasserdruck, der im Diagramm in Bild 7.9 durch den roten Messwertgraph repräsentiert wird, bereits vor dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 nur geringfügig oberhalb des außerhalb der Bohrlöcher in der Gallery 98 gemessenen atmosphärischen Luftdrucks, der durch den hellblauen Messwertgraph dargestellt wird.

Während im Rahmen der numerischen Simulation für den am dichtesten an der Kontur des Observationsbohrlochs DMB-B1 gelegenen Porenwasserdruckaufnehmer die stärkste Porenwasserdruckabsenkung von $PP \approx 0,8$ MPa vor dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 auf $PP \approx -0,05$ MPa zum Ende des Observationszeitraums berechnet worden ist, tritt eine derartige Entwicklung des Porenwasserdrucks in situ nicht ein. Dabei ist in situ weder ein starkes Absinken des Porenwasserdrucks in der Größenordnung von $\Delta PP \approx 0,9$ MPa festzustellen gewesen, noch ist anhand der in situ Messungen die Ausbildung eines teilgesättigten Gebirgsbereiches durch ein Absinken des Messwerts auf den atmosphärischen Luftdruck feststellbar gewesen, wie sie von den Ergebnissen der numerischen Simulation in Bild 7.8 durch das Absinken des Porenwasserdrucks auf einen Zahlenwert von $PP \leq 0$ MPa angezeigt wird. Somit lassen sich für den Fall des Porenwasserdruckaufnehmers innerhalb des Bohrlochs DMB-B5 die größten Differenzen zwischen den gemessenen Porenwasserdruckwerten und den numerisch berechneten Porenwasserdruckwerten sowohl bezüglich der quantitativen Zahlenwerte als auch qualitativ bezüglich des Verlaufs der Porenwasserdruckgraphen feststellen.

Während für den in den Diagrammen in Bild 7.8 und Bild 7.9 in Dunkelblau dargestellten Porenwasserdruck des Porenwasserdruckaufnehmers im Bohrloch DMB-B8 numerisch ein leichtes Absinken des Porenwasserdrucks von einem Zahlenwert von $PP \approx 1,1$ MPa auf einen Zahlenwert von $PP \approx 1,0$ MPa innerhalb des Observationszeitraums ermittelt worden ist, haben die vorgenommenen in situ-Messungen ergeben, dass die Porenwasserdrücke im Bereich des am weitesten von der Kontur des Observationsbohrlochs DMB-B1 entfernten Porenwasserdruckaufnehmers über den gesamten Observationszeitraum hinweg ohne eine deutlich identifizierbare Entwicklung in eine bestimmte Richtung in einem Zahlenwertebereich von $0,63$ MPa $< PP < 0,69$ MPa schwanken.

Damit ist festzustellen, dass nur für den Porenwasserdruckaufnehmer innerhalb des Bohrlochs DMB-B6 und auch nur unmittelbar innerhalb des ersten Monats nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 ein Absinken des Porenwasserdrucks ermittelt werden konnte. Mit den Porenwasserdruckaufnehmern, die innerhalb der Bohrlöcher DMB-B5 und DMB-B8 installiert worden sind, sind dagegen keine durch das Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 induzierten zeitabhängigen Veränderungen der Porenwasserdrücke gemessen worden.

Einen besonderen Fall stellt die innerhalb des Bohrlochs DMB-B7 in einem Abstand von $d \approx 2$ m zur Kontur des Observationsbohrlochs DMB-B1 aufgezeichnete und im Diagramm in Bild 7.9 in Grün dargestellte Porenwasserdruckentwicklung dar. Während anhand des Verlaufs des in Bild 7.8 ebenfalls in Grün dargestellten Zahlenwertgraphs der Ergebnisse der numerischen Simulationen ein Absinken der Porenwasserdruckwerte von einem Zahlenwert von $PP \approx 1,0$ MPa vor dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 auf einen Zahlenwert von $PP \approx 0,9$ MPa zum Ende des Observationszeitraums zu erwarten wäre, steigen die tatsächlich gemessenen Porenwasserdruckwerte innerhalb des Observationszeitraums erstaunlicherweise von einem Ausgangswert von $PP \approx 0,32$ MPa auf einen Zahlenwert von $PP \approx 0,42$ MPa zum Ende des Observationszeitraums an.

Insgesamt lässt sich bezüglich der Gegenüberstellung der mittels des FTK-Simulators berechneten Porenwasserdrücke und der in situ gemessenen Porenwasserdrücke im Rahmen der hier durchgeführten ersten Befassung mit der Simulation eines in situ-Experimentes im Opalinuston mittels des FTK-Simulators unter der Berücksichtigung der Möglichkeit der Ausbildung eines teilgesättigten Porenraumes feststellen, dass keine als zufriedenstellend zu bezeichnende Übereinstimmung zwischen den Berechnungsergebnissen und den in situ gemessenen Ergebnissen erzielt werden konnte. Die hauptsächlich festzustellenden Unterschiede zwischen den gemessenen Porenwasserdruckwerten und den numerisch ermittelten Porenwasserdruckwerten lauten wie folgt:

- (1) Die nach Ablauf der 15 Jahre lang andauernden Strömungsphase zwischen dem Auffahren der Gallery 98 und dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 numerisch ermittelten Porenwasserdrücke liegen deutlich oberhalb der in situ gemessenen Porenwasserdrücke. Einen möglichen Erklärungsansatz für die Diskrepanz zwischen den numerisch berechneten und den in situ gemessenen Porenwasserdruckwerten könnte die Nichtberücksichtigung der Bild 7.1 zu entnehmenden Nähe der Niche MI zum betrachte-

ten Messquerschnitt und des daraus resultierenden zusätzlichen Porenwasserdruckabbaus im verwendeten zweidimensionalen Berechnungsmodell darstellen. Des Weiteren ist nicht auszuschließen, dass die Permeabilitäten des Gesteins in der Nähe der Faziesübergänge deutlich höher sind als die zur Durchführung der numerischen Simulation zur Charakterisierung der hydraulischen Durchlässigkeit verwendeten Zahlenwerte. Höhere Permeabilitäten insbesondere in den Faziesübergangsbereichen sowie darüber hinaus auch in im Gebirge gegebenenfalls vorhandenen und numerisch mit dem verwendeten Modell nicht abbildbaren Kluftbereichen könnten ebenfalls dazu geführt haben, dass die Porenwasserdruckwerte sich innerhalb des Gebirges im Vorfeld des Abteufens des Observationsbohrlochs DMB-B1 deutlich stärker abgesenkt haben als es anhand der Ergebnisse der numerischen Simulationen zu erwarten gewesen ist. Auch die weiteren Tunnels und Strecken des weit verzweigten untertägigen Hohlraumsystems des URL Mont Terri stellen potenzielle Einflussfaktoren dar, die schon im Vorfeld dieses Experimentes zu einer weiteren Absenkung des Porenwasserdrucks im Bereich des betrachteten Messquerschnitts geführt haben könnten.

- (2) Während numerisch für alle vier Porenwasserdruckaufnehmer ein zeitabhängiges Absinken des Porenwasserdrucks als Folge des Abteufens des Observationsbohrlochs DMB-B1 über den gesamten Betrachtungszeitraum hinweg festgestellt werden konnte, konnte in situ nur für einen der Porenwasserdruckaufnehmer eine vergleichsweise kurze Porenwasserdruckabbauphase gemessen werden. Mittels der weiteren drei Porenwasserdruckaufnehmer konnte kein Absinken der Porenwasserdrücke im Gebirge festgestellt werden. Während mit zwei der Porenwasserdruckaufnehmer keinerlei signifikante Veränderungen der Porenwasserdrücke im Gebirge innerhalb des Observationszeitraums festgestellt werden konnten, zeigte einer der Porenwasserdruckaufnehmer sogar einen nahezu kontinuierlichen Anstieg des Porenwasserdrucks in seiner Umgebung an. Ein derart komplexes hydraulisches Gebirgsverhalten ist mit den bisher zur Verfügung stehenden Informationen nicht zu erklären und dementsprechend, unabhängig vom verwendeten Simulationsinstrumentarium, auch nicht numerisch abbildbar. Hier besteht zunächst erheblicher weiterer Erkundungsbedarf des Gebirges insbesondere in Bezug auf gegebenenfalls vorhandene Kluft- und Trennflächensysteme sowie in Bezug auf gegebenenfalls vorhandene bevorzugte hydraulische Wegsamkeiten und wasserführende Schichten.

7.5 Weitere ausgewählte Berechnungsergebnisse im Hinblick auf den Vergleich der Simulatoren

Bevor im nachfolgenden Abschnitt 7.6 die Gegenüberstellung von ausgewählten, mit den beiden Simulatoren FTK und CODE_BRIGHT generierten Berechnungsergebnissen erfolgt, werden im vorliegenden Abschnitt 7.5 zunächst weitere mit dem FTK-Simulator berechnete Simulationsergebnisse zum hydraulischen Verhalten des Gebirges in der Umgebung der Gallery 98 und in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 vorgestellt und diskutiert.

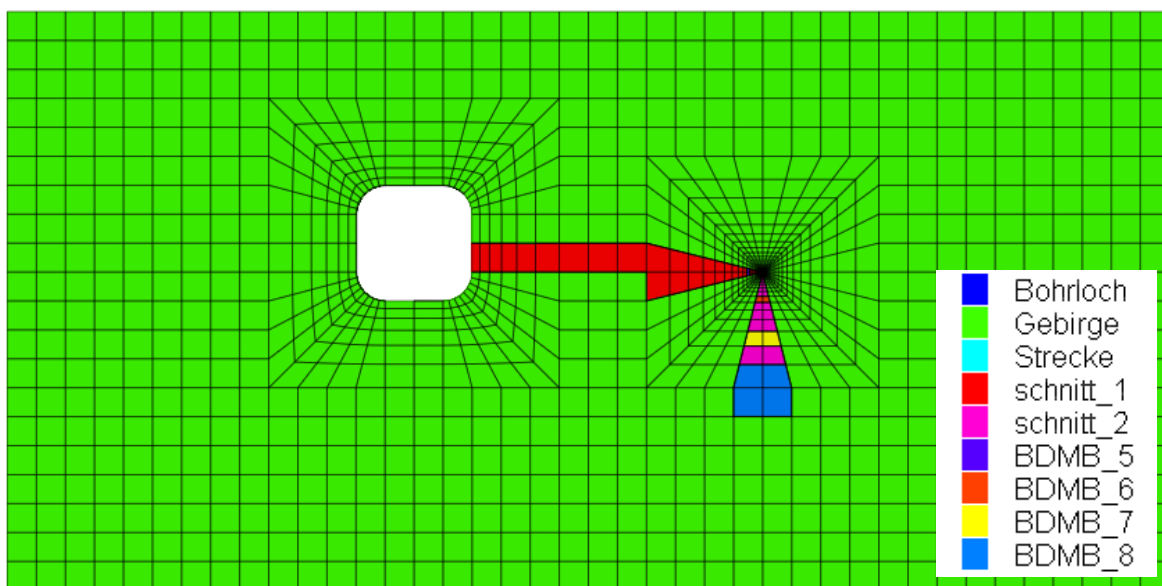


Bild 7.10: Zweidimensionales Bohrloch-Strecken-Modell mit einer farblichen Hervorhebung des Horizontalschnitts (Schnitt 1 / rot) und des Vertikalschnitts (Schnitt 2 / violett) und einer farblichen Hervorhebung derjenigen Zonen des Modells, aus denen die berechneten Porenwasserdrücke zur Gegenüberstellung mit den in situ von den Porenwasserdruckaufnehmern in den Bohrlöchern DMB-B5 bis DMB-B8 gemessenen Porenwasserdrücken herangezogen worden sind

Während im vorangehenden Abschnitt 7.4 im Rahmen der Gegenüberstellung der in situ-Messwerte mit den mittels des FTK-Simulators generierten Ergebnissen die vollständige zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdrücke über den gesamten Simulationszeitraum hinweg an den vier Stellen innerhalb des Gebirges, an denen die Porenwasserdruckaufnehmer installiert worden sind, betrachtet worden ist, werden im vorliegenden Abschnitt ausgewählte hydraulische Zustandsgrößen entlang von zwei Schnitten durch das Gebirge zu je sechs unterschiedlichen Simulationszeitpunkten betrachtet. Die Lage der zwei Schnitte kann Bild 7.10 entnommen werden. Wie der Darstellung in Bild 7.10 zu entnehmen ist, handelt es sich bei den beiden Schnitten um einen Horizontalschnitt, der auf Höhe des Observationsbohrlochs

DMB-B1 zwischen der Streckenkontur und der Bohrlochkontur verläuft, sowie um einen Vertikalschnitt, der unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 senkrecht nach unten in das Gebirge verläuft. Für jeden der zwei Schnitte werden nachfolgend die drei hydraulischen Zustandsgrößen Sättigungsgrad, Porenwasserdruck und Kapillardruck zu sechs verschiedenen Simulationszeitpunkten dargestellt. Für die im Horizontalschnitt zwischen der Streckenkontur und der Bohrlochkontur dargestellten Zustandsgrößen handelt es sich dabei um die Simulationszeitpunkte $t = 0$ d unmittelbar nach der Simulation des Streckenvortriebs und vor dem Beginn der Strömungssimulation, $t = 100$ d, $t = 200$ d, $t = 5475$ d (15 Jahre Strömungssimulation), Zeitpunkt unmittelbar vor der Simulation des Bohrlochabteufens, $t = 5575$ d und den Simulationszeitpunkt $t = 5961$ d zum Ende des Simulationszeitraums. Für die Darstellung im Vertikalschnitt unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 sind die drei hydraulischen Zustandsgrößen zu den Simulationszeitpunkten $t = 0$ d unmittelbar nach der Simulation des Bohrlochabteufens und vor Beginn der Strömungsphase, $t = 10$ d, $t = 50$ d, $t = 100$ d, $t = 200$ d sowie zum Simulationszeitpunkt $t = 487$ d zum Ende des Simulationszeitraums ausgewählt worden. Während sich die Zeitangabe für die Darstellung der hydraulischen Zustandsgrößen im Horizontalschnitt somit auf den Zeitpunkt des Streckenvortriebs als Nullpunkt bezieht, ist für die Betrachtung der Simulationsergebnisse im Vertikalschnitt unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 der Zeitpunkt der Simulation des Bohrlochabteufens als Nullpunkt ausgewählt worden.

Bild 7.11 zeigt zunächst die zeitabhängige Entwicklung des Sättigungsgrades entlang des Horizontalschnitts innerhalb des $\Delta t > 16$ a lang andauernden Simulationszeitraums. Anhand des Verlaufs der den sechs unterschiedlichen Simulationszeitpunkten zuzuordnenden Zahlenwertegraphen kann im Diagramm in Bild 7.11 betrachtet werden, wie sich zunächst innerhalb der ersten 15 Jahre des Simulationszeitraums zwischen der Simulation des Streckenvortriebs und der Simulation des Bohrlochabteufens ausgehend von der Streckenkontur bei $x = -10$ m ein teilgesättigter Gebirgsbereich zeitabhängig ausbildet.

Zum Zeitpunkt des Abteufens des Observationsbohrlochs 15 Jahre nach der Simulation des Streckenabteufens hat sich der teilgesättigte Gebirgsbereich $l \approx 7$ m weit um die Streckenkontur herum in das Gebirge hinein ausgeweitet. In den weiteren 16 Monaten des Simulationszeitraums ändert sich die Ausweitung des teilgesättigten Gebirgsbereiches um die Streckenkontur herum nicht mehr nennenswert, wie ebenfalls der Betrachtung von Bild 7.11 entnom-

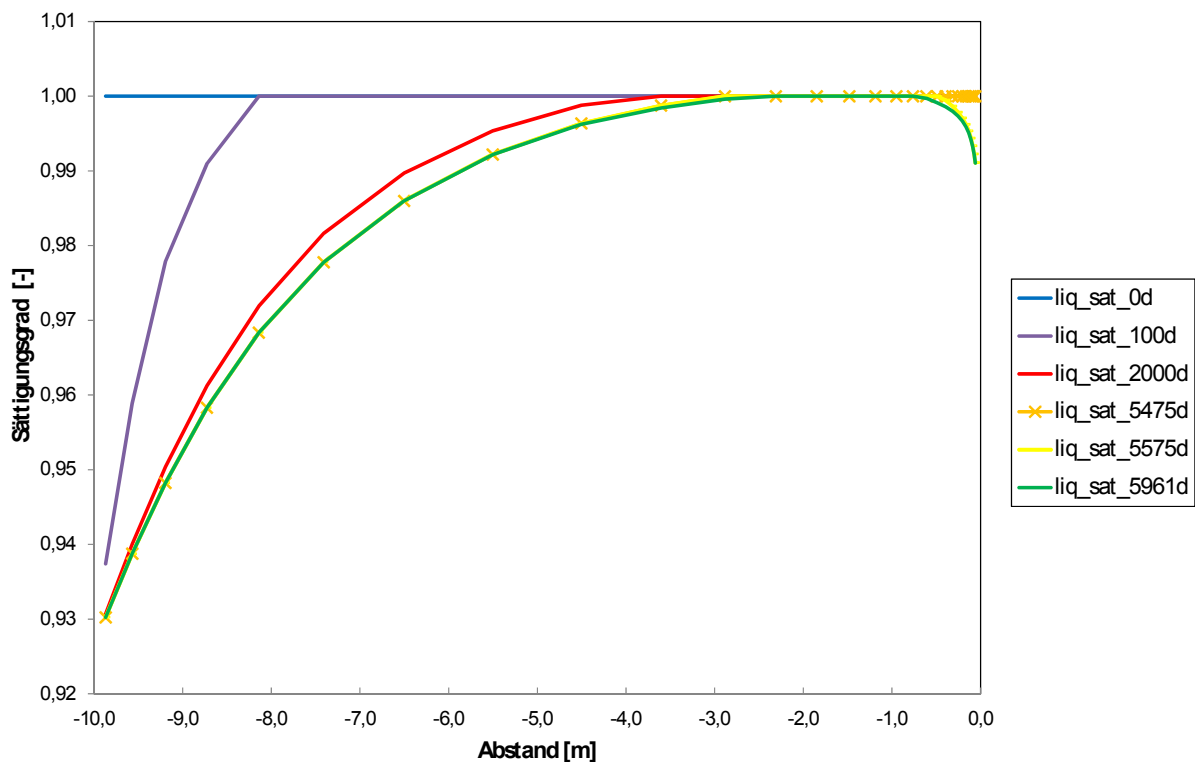


Bild 7.11: Zeitabhängige Entwicklung des Sättigungsgrades des Porenraums des Gesteins entlang eines $d = 10$ m langen, horizontalen Schnittes von der Streckenkontur zur Bohrlochkontur

men werden kann. Anhand der zu den beiden letzten hier diskutierten Simulationszeitpunkten generierten Simulationsergebnisse mit den dazugehörigen gelben und grünen Zahlenwertegraphen im Diagramm in Bild 7.11 lässt sich erkennen, dass, während sich die teilgesättigte Zone um die Strecke herum nur noch leicht vergrößert, die teilgesättigte Zone um das Observationsbohrloch DMB-B1 herum innerhalb der ersten 100 Tage nach der Simulation des Abteufens eine Ausdehnung von $l \approx 0,5$ m ins Gebirge hinein erreicht und dass sie sich schließlich zum Ende des Simulationszeitraums $t = 487$ d nach der Simulation des Abteufens $l \approx 0,7$ m weit in das Gebirge hinein erstreckt. Somit bleibt das Gebirge zwischen den beiden betrachteten untertägigen Hohlräumen zum Ende des Simulationszeitraums lediglich auf einer Länge von $l \approx 2,0$ m vollständig wassergesättigt. Damit lässt sich bereits anhand der Darstellung der Sättigungsgrade des Gesteins in Bild 7.11 erahnen, dass die Gallery 98 einen signifikanten Einfluss auf die hydraulischen Bedingungen in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 ausübt. Weitaus deutlicher wird der hydraulische Einfluss der Gallery 98 auf das Observationsbohrloch DMB-B1 bei der Betrachtung des Diagramms in Bild 7.12. In dem in Bild 7.12 dargestellten Diagramm ist die zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdrücke zu den sechs unterschiedlichen Simulationszeitpunkten zu betrachten.

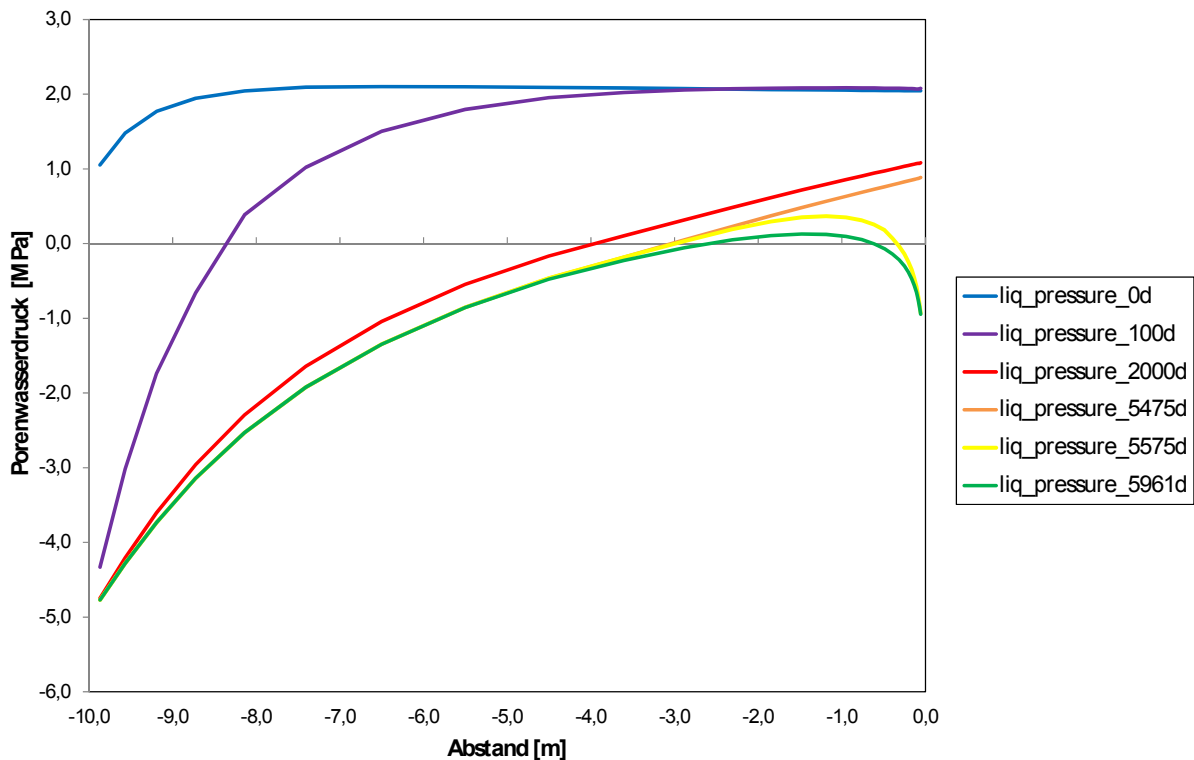


Bild 7.12: Zeitabhängige Entwicklung des Porenwasserdrucks im Porenraum des Gesteins entlang eines $d = 10$ m langen horizontalen Schnittes von der Streckenkantur zur Bohrlochkontur

Während zu Beginn des Simulationszeitraums unmittelbar nach der Simulation des Streckenausbruchs lediglich direkt an der Kontur der Strecke und in der näheren Umgebung der Strecke ein durch die Volumenzunahme der Gebirgsэлеmente in der Umgebung der Strecke bedingter Porenwasserdruckabfall festgestellt werden kann, herrscht in weiten Teilen des betrachteten Gebirgsbereichs zu diesem Simulationszeitpunkt noch der initiale Porenwasserdruck von $PP_i = 2,0$ MPa. Bereits $t = 100$ d nach dem Streckenvortrieb hat sich die hydraulische Situation in der Umgebung der Gallery 98 maßgeblich verändert. Der teilgesättigte Gebirgsbereich, in dem negative Porenwasserdrücke vorherrschen, reicht bereits $l \approx 1,7$ m weit in das Gebirge hinein und der initiale Porenwasserdruck wird erst in einer Entfernung von $d \approx 7,5$ m zur Kontur der Gallery 98 erreicht. Dem Verlauf der weiteren Zahlenwertegraphen im Diagramm in Bild 7.12 ist zu entnehmen, wie sich die Ausbreitung der teilgesättigten Zone und der Porenwasserdruckabbau im Gebirge bis zum Simulationszeitpunkt $t = 5475$ d unmittelbar vor der Simulation des Abteufens des Observationsbohrlochs DMB-B1 weiter fortsetzen, sodass sich der teilgesättigte Gebirgsbereich unmittelbar vor dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 $l \approx 7$ m weit in das Gebirge hinein erstreckt und der Porenwasserdruck in dem Gebirgsbereich, in dem das Observationsbohrloch DMB-B1 abgeteuft wird, sich

von dem ursprünglichen Zahlenwert von $PP_i = 2,0$ MPa auf einen Zahlenwert von $PP \approx 0,8$ MPa reduziert hat. Im Anschluss an die Simulation des Abteufens des Observationsbohrlochs DMB-B1 schreiten die Entsättigung des Gebirges und der Abbau des Porenwasserdrucks nun nicht mehr nur von der Kontur der Gallery 98 aus ausgehend voran, sondern ebenfalls von der Kontur des Observationsbohrlochs DMB-B1 aus ausgehend. Aus der nun beidseitig voranschreitenden Entwässerung des Gebirges zwischen den beiden untertägigen Hohlräumen resultiert ein Absinken des Porenwasserdrucks im hier betrachteten Gebirgsbereich auf einen maximalen Zahlenwert von $PP_{\max} \approx 0,4$ MPa zum Simulationszeitpunkt $t = 100$ d nach der Simulation des Bohrlochabteufens und auf einen Zahlenwert von $PP_{\max} \approx 0,15$ MPa zum Ende des Simulationszeitraums $t = 487$ d nach der Simulation des Bohrlochabteufens. Somit liegt zum Ende des Simulationszeitraums der im betrachteten Gebirgsbereich maximal vorherrschende Porenwasserdruck nur noch geringfügig oberhalb des atmosphärischen Luftdrucks.

Etwas deutlicher als bei der Darstellung der Sättigungsgrade in Bild 7.11 lässt sich im Diagramm in Bild 7.12 anhand des Verlaufs des dem letzten betrachteten Simulationszeitpunkt zuzuordnenden grünen Zahlenwertegraphen erkennen, dass der noch vollständig wassergesättigte Gebirgsbereich zwischen den beiden untertägigen Hohlräumen zum Ende des Simulationszeitraums nur noch eine Ausdehnung von $d \approx 2$ m besitzt. Die Darstellung der ermittelten Porenwasserdrücke entlang des Horizontalschnitts zwischen der Gallery 98 und dem Observationsbohrloch DMB-B1 vermittelt somit auf eindrucksvolle Art und Weise, wie sich die hydraulischen Nahfelder der beiden benachbarten untertägigen Hohlräume deutlich überlagern. Im Diagramm in Bild 7.13 sind abschließend die Kapillarspannungen zu betrachten, die innerhalb der teilgesättigten Gebirgsbereiche im Porenraum des Opalinustons wirken.

Die in den teilgesättigten Gebirgsbereichen innerhalb der Porenräume wirksamen Kapillarspannungen werden bei der Durchführung von numerischen Simulationen mittels des FTK-Simulators als Differenzbetrag aus den innerhalb der Porenräume vorherrschenden negativen Porenwasserdrücken und den innerhalb der Porenräume vorherrschenden positiven Porengasdrücken berechnet und liegen daher, wie dem Vergleich der Zahlenwertegraphen in den Diagrammen in Bild 7.12 und in Bild 7.13 entnommen werden kann, betragsmäßig geringfügig oberhalb der berechneten Porenwasserdrücke. Abgesehen von der geringfügigen, durch den Porengasdruck bedingten Differenz weisen die Zahlenwertegraphen der berechneten Kapillarspannungen in den teilgesättigten Gebirgsbereichen nahezu identische Verläufe auf wie die

Zahlenwertegraphen der berechneten Porenwasserdrücke. Aufgrund der Abwesenheit von Gas können innerhalb der vollständig wassergesättigten Gebirgsbereiche in den Porenräumen des Opalinustons keine Kapillarspannungen auftreten. Deshalb ist der Zahlenwert für die Kapillarspannungen in der Darstellung in Bild 7.13 für die nicht teilgesättigten Gebirgsbereiche auf $P_c = 0$ MPa gesetzt worden.

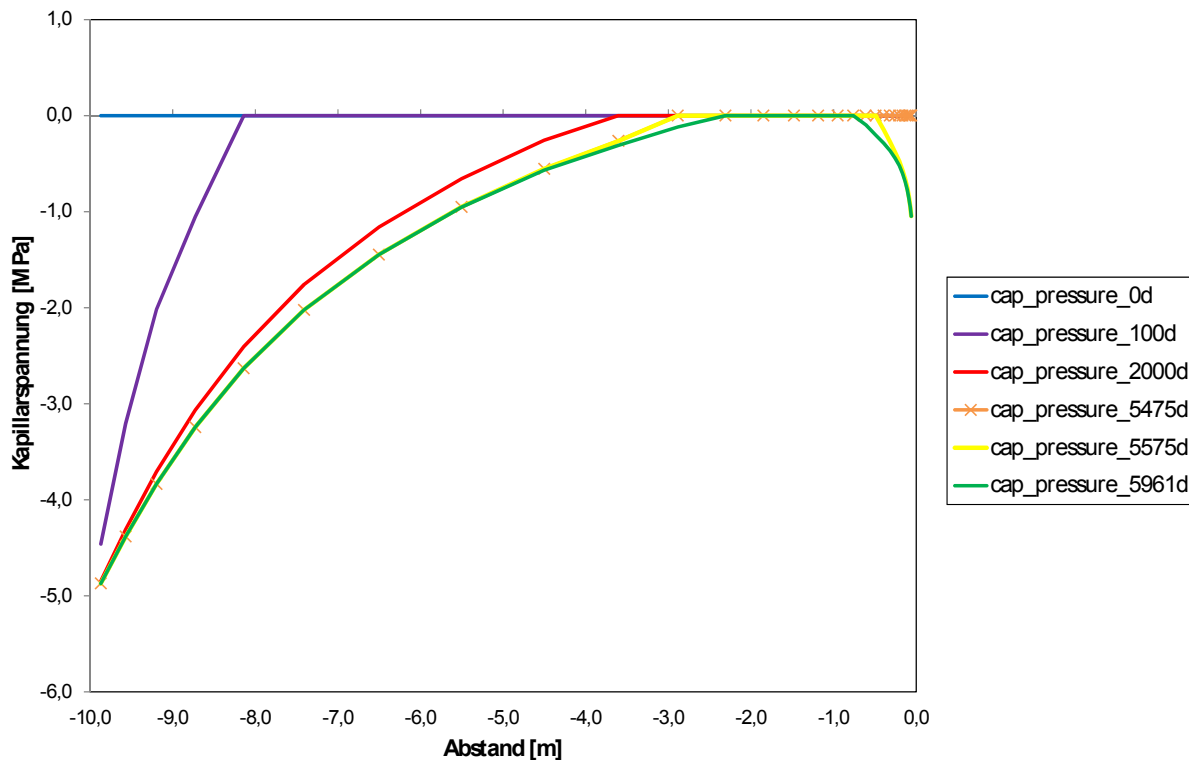


Bild 7.13: Zeitabhängige Entwicklung der Kapillarspannungen innerhalb des Porenraums des Gesteins entlang eines $d = 10$ m langen, horizontalen Schnittes von der Streckenkontur zur Bohrlochkontur

Während in den drei vorangegangenen Diagrammen in Bild 7.11 bis Bild 7.13 die zeitabhängige Entwicklung der drei ausgewählten hydraulischen Zustandsgrößen im Gebirgsbereich zwischen der Streckenkontur der Gallery 98 und der Kontur des Observationsbohrlochs DMB-B1 betrachtet worden ist, in dem sich lediglich einer der vier im Rahmen des DMB-Experimentes zum Einsatz gekommenen Porenwasserdruckaufnehmer befindet, soll nun nachfolgend die zeitabhängige Entwicklung der hydraulischen Zustandsgrößen entlang des Vertikalschnitts unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 betrachtet werden, entlang dessen sich drei der vier im Gebirge zur Durchführung des DMB-Experimentes installierten Porenwasserdruckaufnehmer befinden.

Bild 7.14 zeigt zunächst die zeitabhängige Entwicklung der Sättigungsgrade des Gesteins und dokumentiert somit die Ausbreitung des teilgesättigten Gebirgsbereiches um das Observationsbohrloch DMB-B1 herum im $\Delta t = 487$ d lang andauernden Simulationszeitraum nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1.

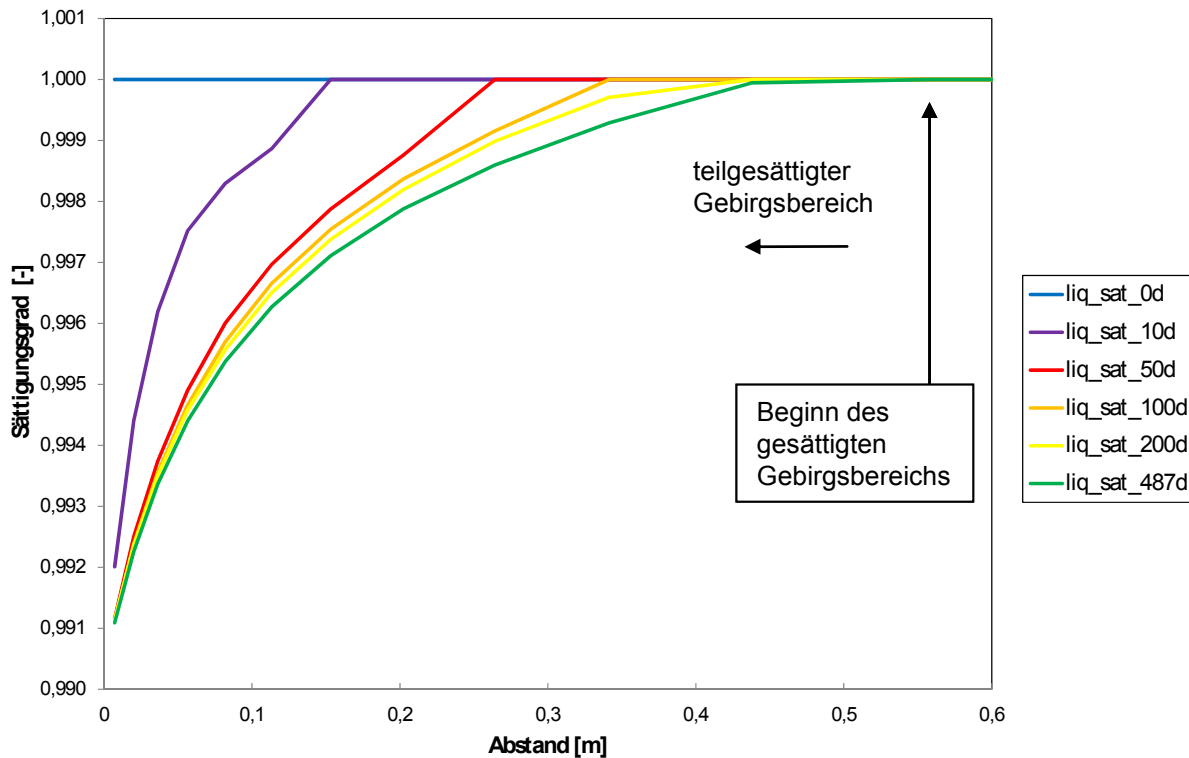


Bild 7.14: Zeitabhängige Entwicklung des Sättigungsgrades des Porenraums des Gesteins entlang eines $l = 0,6$ m langen, vertikalen Schnittes unterhalb der Bohrlochkontur

Da sich entsprechend dem grünen Zahlenwertegraphen im Diagramm in Bild 7.14 der teilgesättigte Gebirgsbereich innerhalb des betrachteten Simulationszeitraums maximal $l = 0,56$ m in das Gebirge unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 hinein erstreckt, ist es für hinreichend erachtet worden, den Vertikalschnitt unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 für die hier durchgeführte Ergebnisdiskussion über eine Länge von $l = 0,6$ m darzustellen.

Die Betrachtung der Zahlenwertegraphen im Diagramm in Bild 7.14 zeigt, wie die Sättigungsgrade des Gesteins innerhalb der unmittelbar an der Kontur des Bohrlochs angeordneten Zone bedingt durch den entlang der Bohrlochkontur als Randbedingung vorgegebenen negativen Porenwasserdruck von $PP = -1$ MPa zeitnah zur Simulation des Bohrlochabteufens einen Wert von $S = 99,1$ % annehmen. Des Weiteren ist der Betrachtung des Diagramms in Bild 7.14 zu entnehmen, wie die Ausbreitung des teilgesättigten Gebirgsbereiches unmittelbar

nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 zunächst schneller voranschreitet, um sich dann gegen Ende des Simulationszeitraums zu verlangsamen. Dem Verlauf des roten Zahlenwertgraphen im Diagramm in Bild 7.14 kann entnommen werden, dass zum Simulationszeitpunkt $t = 50$ d nach der Simulation des Bohrlochabteufens der teilgesättigte Gebirgsbereich sich bereits $l = 0,26$ m in das Gebirge hinein ausgebreitet hat, sodass sich in den verbleibenden 437 Tagen des Simulationszeitraumes nur noch eine Ausbreitung des teilgesättigten Gebirgsbereiches um weitere $\Delta l = 0,3$ m ereignet.

In Bild 7.15 ist die zeitabhängige Entwicklung der Porenwasserdruckverläufe im Vertikalschnitt über eine Länge von $l = 3,5$ m zu betrachten.

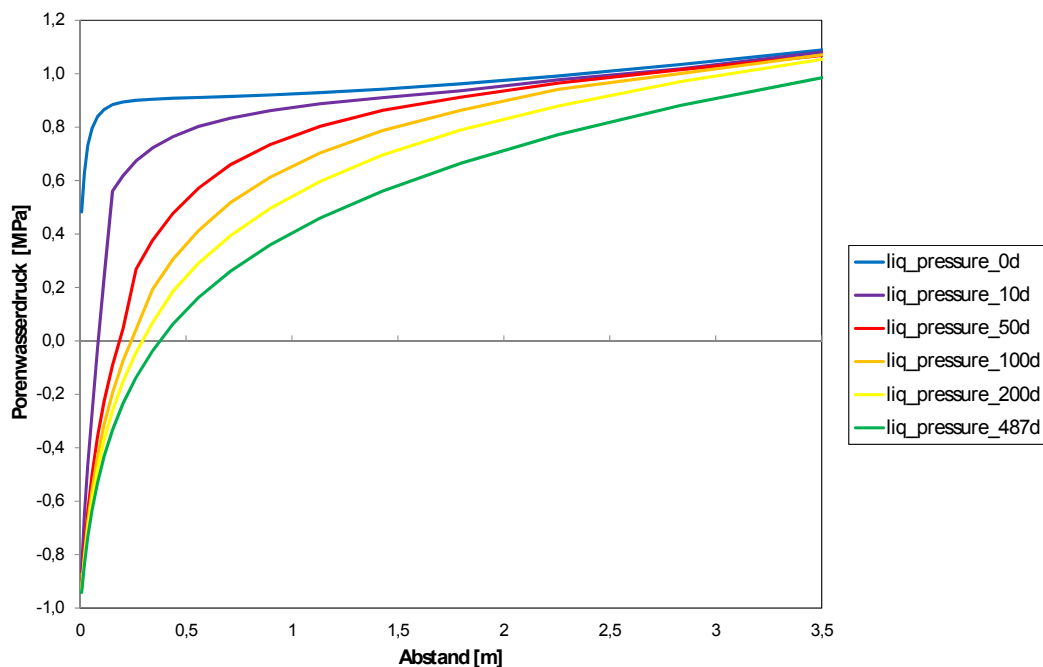


Bild 7.15: Zeitabhängige Entwicklung des Porenwasserdrucks innerhalb des Gesteins entlang eines $l = 3,5$ m langen, vertikalen Schnittes unterhalb der Bohrlochkontur

Anhand des Verlaufs des blauen Zahlenwertgraphen im Diagramm in Bild 7.15 ist zu erkennen, wie vor dem Beginn der Strömungssimulation unmittelbar nach der Simulation des Bohrlochabteufens sowohl das Observationsbohrloch DMB-B1 wie auch die Gallery 98 einen Einfluss auf die Porenwasserdruckverteilung im betrachteten Gebirgsbereich ausüben. Während die starke Absenkung des Porenwasserdrucks von einem Niveau von $PP \approx 0,9$ MPa in einer Entfernung von $d \approx 0,2$ m zur Bohrlochkontur auf ein Niveau von $PP \approx 0,5$ MPa innerhalb der unmittelbar an der Bohrlochkontur gelegenen Zone in erster Linie auf die aus der Simulation des Bohrlochabteufens resultierende Porenraumzunahme in den Gebirgszonen (elastische

Deformation) in der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochs zurückzuführen ist, ist der nahezu lineare Anstieg des Porenwasserdrucks von einem Zahlenwert von $PP \approx 0,9$ MPa in einer Entfernung von $d \approx 0,2$ m zur Bohrlochkontur auf einen Zahlenwert von $PP \approx 1,1$ MPa in einer Entfernung von $d \approx 3,5$ m zur Bohrlochkontur in erster Linie dem in den $\Delta t = 15$ a vor dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 infolge des Ausbruchs der Gallery 98 stattfindenden Porenwasserdruckabbau zuzuschreiben. Der durch die Gallery 98 bedingte Porenwasserdruckabbau ist am Ausgangspunkt des betrachteten Vertikalschnittes bei $d = 0$ m weiter vorangeschritten als weiter unterhalb des Observationsbohrlochs in einer Entfernung von $d \approx 3,5$ m zur Kontur des Observationsbohrlochs DMB-B1, da sich der Anfangspunkt des Vertikalschnittes näher an der Kontur der Gallery 98 befindet als der Endpunkt des Vertikalschnittes.

Somit verdeutlicht die Darstellung der Porenwasserdruckverteilung unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 im Diagramm in Bild 7.15, wie sich der hydraulische Einfluss der beiden modellierten untertägigen Hohlräume auch in einer Entfernung von $d > 10$ m zur Kontur der Gallery 98 überlagert. Das weitere der Betrachtung von Bild 7.15 zu entnehmende Absinken der Porenwasserdrücke im Gebirge unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 ist wiederum nahezu vollständig den durch das Bohrlochabteufen hervorgerufenen Strömungsprozessen zuzuschreiben, da davon auszugehen ist, dass der durch das Auffahren der Gallery 98 hervorgerufene Porenwasserdruckabbauprozess sich zu den hier betrachteten Simulationszeitpunkten $t > 15$ a nach dem Ausbruch des modellierten Gallery-Querschnitts im betrachteten Gebirgsbereich bereits erheblich verlangsamt hat.

In guter Übereinstimmung mit der Darstellung der Ausbreitung des teilgesättigten Gebirgsbereiches im Diagramm in Bild 7.14 ist auch anhand der Verläufe der Zahlenwertegraphen im Diagramm in Bild 7.15 zu erkennen, wie sich der teilgesättigte Gebirgsbereich, in dem negative Porenwasserdrücke herrschen, unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 zeitabhängig in das Gebirge hinein ausbreitet.

Zur Vervollständigung der Darstellung von ausgewählten hydraulischen Zustandsgrößen im Gebirgsbereich unterhalb des Observationsbohrlochs BDMB 1 wird in Bild 7.16 schließlich die zeitabhängige Entwicklung der im teilgesättigten Gebirgsbereich innerhalb der Porenräume des Opalinustons auftretenden Kapillarspannungen dargestellt.

Deutlicher als bei der Darstellung der zeitabhängigen Entwicklung der Sättigungsgrade des Gesteins im Diagramm in Bild 7.14 kann anhand der Betrachtung des Verlaufs des grünen

Zahlenwertegraphen im Diagramm in Bild 7.16 die Ausdehnung des teilgesättigten Gebirgsbereiches bis zu einem Abstand von $d = 0,56$ m zur Bohrlochkontur in das Gebirge hinein zum Ende des Simulationszeitraums nachvollzogen werden. Auffällig bei der Betrachtung der Zahlenwertegraphen in Bild 7.16 ist die Tatsache, dass die Kapillardruckkurven zu allen fünf Simulationszeitpunkten nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 ca. 5 - 10 Zentimeter bevor der Randbereich der teilgesättigten Gebirgszone erreicht wird und die Kapillardrücke auf Null absinken, einen mehr oder weniger stark ausgeprägten Verlaufsrichtungswechsel aufweisen. Der dem letzten betrachteten Simulationszeitpunkt zum Ende des Simulationszeitraums zuzuordnende grüne Zahlenwertegraph weist bei $d = 0,44$ m einen besonders deutlich zu erkennenden Verlaufsrichtungswechsel auf. Zur Aufklärung der Ursache für die innerhalb der fünf Zahlenwertegraphen zu identifizierenden Verlaufsrichtungswechsel und insbesondere zur Beantwortung der Frage, ob die Verläufe der Zahlenwertegraphen, wie sie in Bild 7.16 zu betrachten sind, auf einen numerischen Effekt zurückgeführt werden können, oder ob für das zu beobachtende Phänomen ein geohydraulisch-geomechanischer Erklärungsansatz existiert, ist zunächst in Zukunft eine weitere intensive Befassung mit der Thematik der Simulation des hydraulischen Zweiphasenflusses erforderlich.

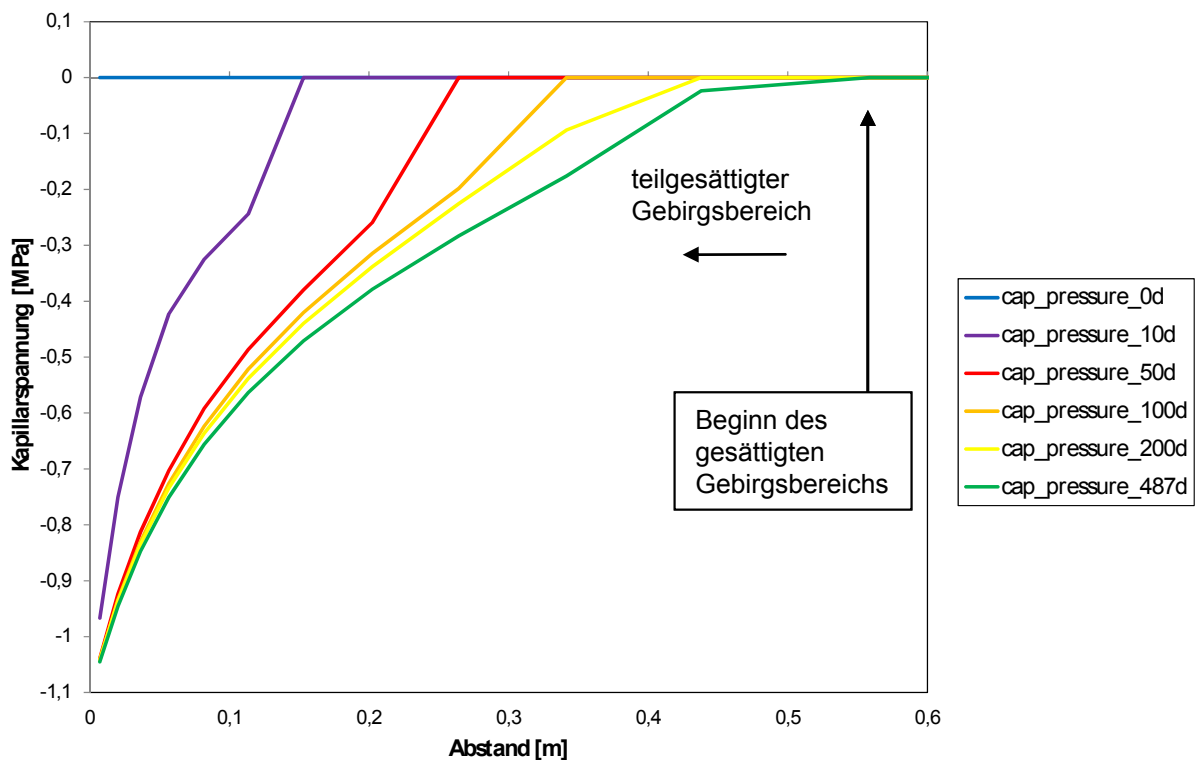


Bild 7.16: Zeitabhängige Entwicklung der Kapillardrücken innerhalb des Porenraums des Gesteins entlang eines $l = 0,6$ m langen, vertikalen Schnittes unterhalb der Bohrlochkontur

7.6 Gegenüberstellung von ausgewählten, mit den beiden Simulatoren FTK und CODE_BRIGTH generierten Berechnungsergebnissen

Im vorliegenden Abschnitt werden ausgewählte mittels des FTK-Simulators generierte Simulationsergebnisse mit Simulationsergebnissen, die mit dem Simulator CODE_BRIGTH ermittelt worden sind, gegenübergestellt. Für die Ergebnisgegenüberstellung werden vier unterschiedliche Zustandsgrößen entlang der beiden bereits im vorangehenden Abschnitt 7.5 betrachteten Schnitte durch das Gebirge zu zwei unterschiedlichen Simulationszeitpunkten betrachtet. Bei den zwei betrachteten Simulationszeitpunkten handelt es sich zum einen um den Simulationszeitpunkt $t = 15$ a nach der Simulation des Ausbruchs der Gallery 98 unmittelbar vor der Simulation des Bohrlochabteufens und zum anderen um den Simulationszeitpunkt zum Ende des Simulationszeitraums $t = 487$ d nach der Simulation des Abteufens des Observationsbohrlochs DMB-B1. Bei den vier betrachteten Zustandsgrößen handelt es sich um die beiden hydraulischen Zustandsgrößen *Porenwasserdruck* und *Sättigungsgrad* sowie um die zwei mechanischen Zustandsgrößen *Horizontalspannung* und *Vertikalspannung*. In allen vier nachfolgend dargestellten Diagrammen handelt es sich bei den dargestellten Gebirgsspannungen um die innerhalb des Gebirges vorherrschenden totalen Spannungen σ_{tot} . Die berechneten Zahlenwertegraphen der Vertikalspannungen sind jeweils in Grün dargestellt, während die Zahlenwertegraphen der Horizontalspannungen an ihrer roten Farbe zu identifizieren sind. Die Zahlenwertegraphen der berechneten Sättigungsgrade sind in Blau dargestellt und die orangefarbenen Zahlenwertegraphen in den nachfolgenden vier Diagrammen repräsentieren die berechneten Porenwasserdrücke. In alle vier Diagramme sind jeweils sowohl die mittels des FTK-Simulators wie auch die mittels des Simulators CODE_BRIGTH generierten Berechnungsergebnisse eingefügt worden. Zur Differenzierung in Abhängigkeit von dem zur Berechnung der dargestellten Zustandsgrößen verwendeten Simulator werden die Zahlenwertegraphen der mittels des FTK-Simulators berechneten Simulationsergebnisse in Form einer mit Rauten versehenen durchgezogenen Linie dargestellt, während die mittels des Simulators CODE_BRIGTH generierten Simulationsergebnisse durch eine mit Kreuzen versehene, nicht vollständig durchgängige Linie repräsentiert werden. In der Legende der nachfolgenden Diagramme werden die Zahlenwertegraphen der mittels des FTK-Simulators berechneten Zustandsgrößen jeweils mit dem Kürzel *FTK* versehen und die mittels des Simulators CODE_BRIGTH berechneten Zustandsgrößen erhalten zur Identifizierung den Zusatz *CB*.



Bild 7.17 zeigt zunächst die vier unterschiedlichen Zustandsgrößen entlang des Horizontalschnittes beginnend bei $x = -10$ m an der Kontur der Gallery 98 bis hin zum Mittelpunkt des Observationsbohrlochs DMB-B1 bei $x = 0$ m zum Simulationszeitpunkt $t = 15$ a nach der Simulation des Ausbruchs der Gallery 98.

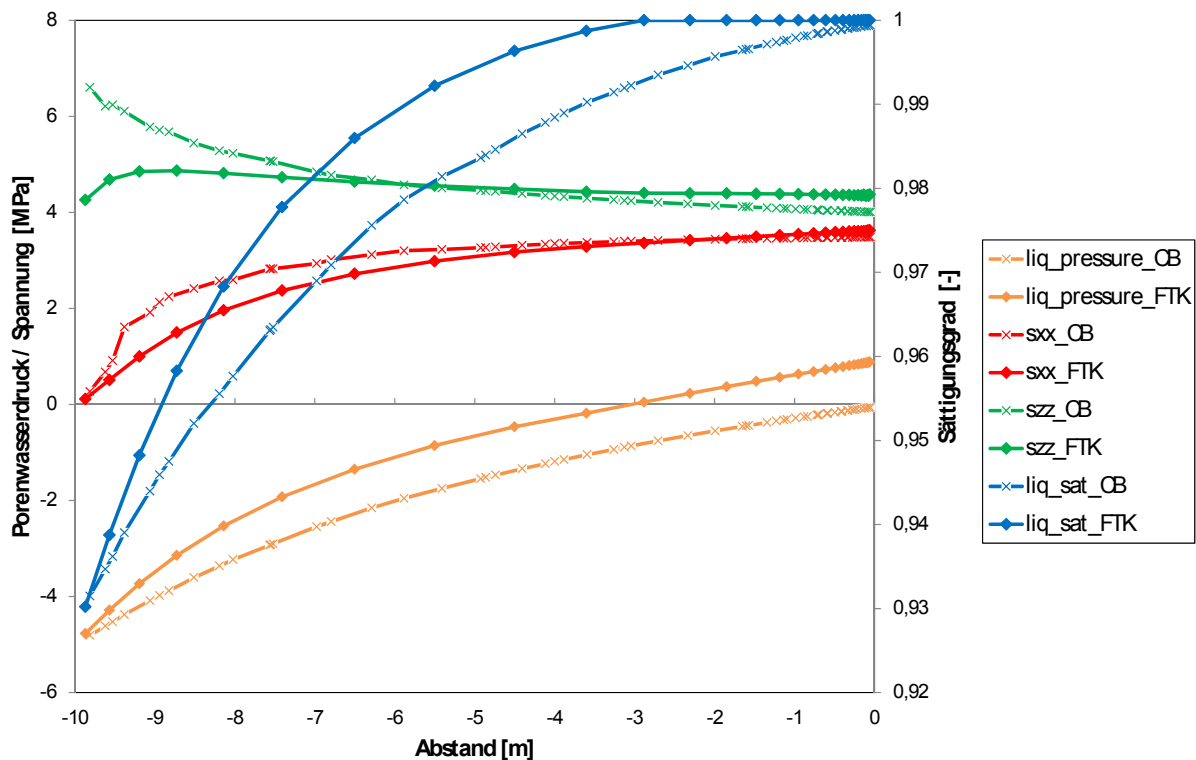


Bild 7.17: Gegenüberstellung der mittels der zwei Simulatoren FTK und CODE_BRIGTH generierten Zustandsgrößen Porenwasserdruck (orangefarbene Graphen), Horizontalspannung (rote Graphen), Vertikalspannung (grüne Graphen) und Sättigungsgrad des Porenraums (blaue Graphen) zum Simulationszeitpunkt $t = 15$ a nach der Auffahrung der Strecke und somit unmittelbar vor der Simulation des Bohrlochabteufens entlang eines $d = 10$ m langen, horizontalen Schnittes von der Streckenkontur zur Bohrlochkontur

Sowohl bezüglich der hydraulischen wie auch bezüglich der mechanischen Zustandsgrößen sind bei der Betrachtung von Bild 7.17 zwischen den mittels des FTK-Simulators und den mittels des Simulators CODE_BRIGTH berechneten Ergebnissen zum Teil signifikante quantitative und qualitative Unterschiede identifizierbar. Der größte Unterschied zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Berechnungsergebnissen bezüglich der hydraulischen Zustandsgrößen lässt sich sehr gut anhand der Betrachtung der zwei Zahlenwertegraphen zur Darstellung der berechneten Sättigungsgrade erkennen. Während an der Kontur der Gallery 98 bedingt durch die dort vorgegebene Porenwasserdruckrandbedin-

gung von $PP_{RB} = -5$ MPa für beide Berechnungen zum betrachteten Simulationszeitpunkt ein Sättigungsgrad des Gesteins von $S \approx 93$ % vorliegt, steigt der mittels des FTK-Simulators berechnete Zahlenwertegraph mit zunehmender Distanz von der Kontur der Gallery deutlich stärker an als der Zahlenwertegraph der mittels des Simulators CODE_BRIGTH generierten Sättigungsgrade. Während daher der mittels des FTK-Simulators berechnete Sättigungsgrad des Gebirges in einem Abstand von $d \approx 7$ m zur Kontur der Gallery 98 einen Zahlenwert von $S = 100$ % erreicht und das Gebirge somit zum Simulationszeitpunkt unmittelbar vor dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 ab einer Entfernung von $d \approx 3$ m zu der Stelle innerhalb des Gebirges, an der das Observationsbohrloch DMB-B1 abgeteuft wird, gemäß der Berechnungsergebnisse des FTK-Simulators als vollständig wassergesättigt zu bezeichnen ist, wird gemäß der mittels des Simulators CODE_BRIGTH generierten Simulationsergebnisse ein Sättigungsgrad von $S = 100$ % auch bei $x = 0$ m in einer Entfernung von $d = 10$ m zur Kontur der Gallery 98 nicht erreicht. Stattdessen liegt der gemäß der Berechnung mittels des Simulators CODE_BRIGTH für diese Position im Gebirge berechnete Sättigungsgrad minimal unterhalb eines Zahlenwertes von $S = 100$ %. Daraus folgt, dass der Gebirgsbereich, in dem das Observationsbohrloch DMB-B1 abgeteuft wird, bereits vor der Simulation des Bohrlochabteufens allein durch den hydraulischen Einfluss der Gallery 98 teilentsättigt worden ist. Im Hinblick auf die hier durchgeführte numerische Analyse zum hydraulischen Verhalten des Gebirges in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 stellt die in Abhängigkeit vom verwendeten Simulator berechnete Differenz bezüglich der Ausdehnung der teilgesättigten Gebirgszone um die Gallery 98 herum von $\Delta x > 3$ m insbesondere deshalb einen signifikanten Ergebnisunterschied dar, da je nach verwendetem Simulator das Observationsbohrloch DMB-B1 innerhalb oder außerhalb des teilgesättigten Gebirgsbereiches abgeteuft wird.

Passend zum vorangehend diskutierten Verlauf der Sättigungsgrade entlang des Horizontalschnitts zwischen der Gallery 98 und dem Observationsbohrloch DMB-B1 bestehen auch bezüglich der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren entlang des betrachteten Horizontalschnitts berechneten Porenwasserdruckverteilungen maßgebliche Differenzen. Während die mittels des FTK-Simulators berechneten Porenwasserdrücke vom als Randbedingung an der Kontur der Gallery 98 vorgegebenen Zahlenwert von $PP_{RB} = -5,0$ MPa entlang des betrachteten Horizontalschnittes auf einen Zahlenwert von $PP \approx 0,8$ MPa anwachsen und dabei entsprechend der vorangehenden Ausführungen zum berechneten Sättigungsgrad des Gebirges bei $x \approx -3$ m positive Zahlenwerte annehmen, erreichen die mittels des Simulators CODE_BRIGTH berechneten Porenwasserdrücke im betrachteten Gebirgsbereich konsequenter-

weise keine positiven Zahlenwerte, sondern sie weisen auch bei $x = 0$ m zwar betragsmäßig sehr geringe, aber dennoch negative Zahlenwerte auf.

In Bezug auf die vergleichsweise betrachteten mechanischen Zustandsgrößen lässt sich eher entgegen der Erwartung feststellen, dass sowohl zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Vertikalspannungsverteilungen wie auch zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Horizontalspannungsverteilungen quantitative und qualitative Unterschiede bestehen. Die signifikanteren Ergebnisdifferenzen haben sich, wie der Betrachtung des Diagramms in Bild 7.17 zu entnehmen ist, zwischen den mittels des FTK-Simulators und mittels des Simulators CODE_BRIGTH generierten Vertikalspannungen ergeben. Während beide berechneten Zahlenwertgraphen der Horizontalspannungen nahe der Kontur der Gallery 98 einen Zahlenwert geringfügig oberhalb von $\sigma_h = 0$ MPa aufweisen, um daraufhin entlang des betrachteten Horizontalschnitts auf Zahlenwerte von $\sigma_h \approx 3,6$ MPa für die Berechnung mittels des Simulators CODE_BRIGTH und Zahlenwerte von $\sigma_h \approx 3,7$ MPa für die Berechnung mittels des FTK-Simulators bei $x = 0$ m anzuwachsen, wobei der mittels des Simulators CODE_BRIGTH berechnete Zahlenwertgraph in der Umgebung der Gallery 98 einen etwas steileren Anstieg und einen insgesamt unruhigeren Verlauf aufweist als der mittels des FTK-Simulators generierte Zahlenwertgraph der Horizontalspannungen, besteht zwischen den für die Vertikalspannungsverteilung berechneten Zahlenwertgraphen ein bei der Betrachtung von Bild 7.17 zu identifizierender grundlegender Unterschied. Während der mittels des Simulators CODE_BRIGTH berechnete Zahlenwertgraph in unmittelbarer Nähe zur Kontur der Gallery 98 einen Zahlenwert von $\sigma_v = 6,7$ MPa aufweist, um ausgehend von diesem Maximalwert entlang des betrachteten Horizontalschnitts zunächst relativ steil abzufallen, danach abzuflachen und schließlich bei $x = 0$ m einen Zahlenwert von $\sigma_v = 4,0$ MPa zu erreichen, weist der mittels des FTK-Simulators für die Vertikalspannungen generierte Zahlenwertgraph einen grundsätzlich anderen Verlauf auf. Beginnend mit einem Zahlenwert von $\sigma_v \approx 4,1$ MPa in unmittelbarer Nähe zur Kontur der Gallery 98 steigen die berechneten Vertikalspannungswerte entlang des betrachteten Horizontalschnitts zunächst an, bis der Zahlenwertgraph bei $x = -9,2$ m mit einem Zahlenwert von $\sigma_v \approx 4,9$ MPa sein absolutes Maximum erreicht, um anschließend entlang des Horizontalschnitts langsam auf seinen Endwert von $\sigma_v \approx 4,2$ MPa bei $x = 0$ m abzusinken.

Wie Bild 7.3 und Bild 7.4 in Abschnitt 7.3 zu entnehmen ist, weist die Kontur der Gallery 98 sowohl in dem von der GRS für die Berechnungen mittels des Simulators CODE_BRIGTH

verwendeten Modell sowie auch in dem vom LfD&G zur Durchführung der Berechnungen unter Verwendung des FTK-Simulators angewendeten Modell auf Höhe des hier betrachteten Horizontalschnitts einen linearen, vertikalen Verlauf auf.

Bedingt durch die nicht kreisrunde Kontur eines untertägigen Hohlraums kommt es für gewöhnlich im Gebirge in der näheren Umgebung des Hohlraums zur Ausbildung eines so genannten Druckschattens. Das bedeutet, dass die tangentialen Spannungen entlang der nicht kreisrunden Kontur in der unmittelbaren Umgebung des Hohlraums sich nicht wie bei einer kreisrunden Hohlraumkontur üblich deutlich gegenüber den vorherrschenden Primärspannungen erhöhen, sondern dass sie nach dem Hohlraumausbruch etwa auf dem Primärspannungsniveau verbleiben oder gegebenenfalls sogar unter das Primärspannungsniveau absinken. Die durch den Hohlraumausbruch im Gebirge induzierte zusätzliche Belastung muss dann durch das weiter von der Hohlraumkontur entfernt gelegene Gestein abgetragen werden, sodass es nicht unmittelbar an der Hohlraumkontur, sondern in tiefer gelegenen Gebirgsbereichen zur Ausbildung einer dann allerdings abgeflachten Spannungsspitze kommt, wie sie in Bild 7.17 für die Ergebnisse der Berechnungen mittels des FTK-Simulators bei $x = -9,2$ m betrachtet werden kann. Aus gebirgsmechanischer Sicht liegt mit der Abbildung einer tiefer im Gebirge gelegenen abgeflachten Spannungsspitze bei der Verwendung des FTK-Simulators und der Abbildung einer nicht abgeflachten Spannungsspitze unmittelbar an der Kontur der Gallery 98 bei der Verwendung des Simulators CODE_BRIGHT eine signifikante qualitative Differenz zwischen den unter Verwendung der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Berechnungsergebnissen vor.

Zur Fortführung des Vergleichs der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Berechnungsergebnisse werden im Diagramm in Bild 7.18 die vier betrachteten Zustandsgrößen entlang des Horizontalschnitts zum Simulationszeitpunkt $t = 487$ d nach der Simulation des Bohrlochabteufens dargestellt. Wie die vergleichende Betrachtung von Bild 7.17 und Bild 7.18 verdeutlicht, ergibt sich in der näheren Umgebung der Gallery 98 durch die Simulation des Abteufens des Observationsbohrlochs DMB-B1 keine signifikante Änderung bezüglich einer der vier hier vergleichend betrachteten geomechanisch-geohydraulischen Zustandsgrößen.

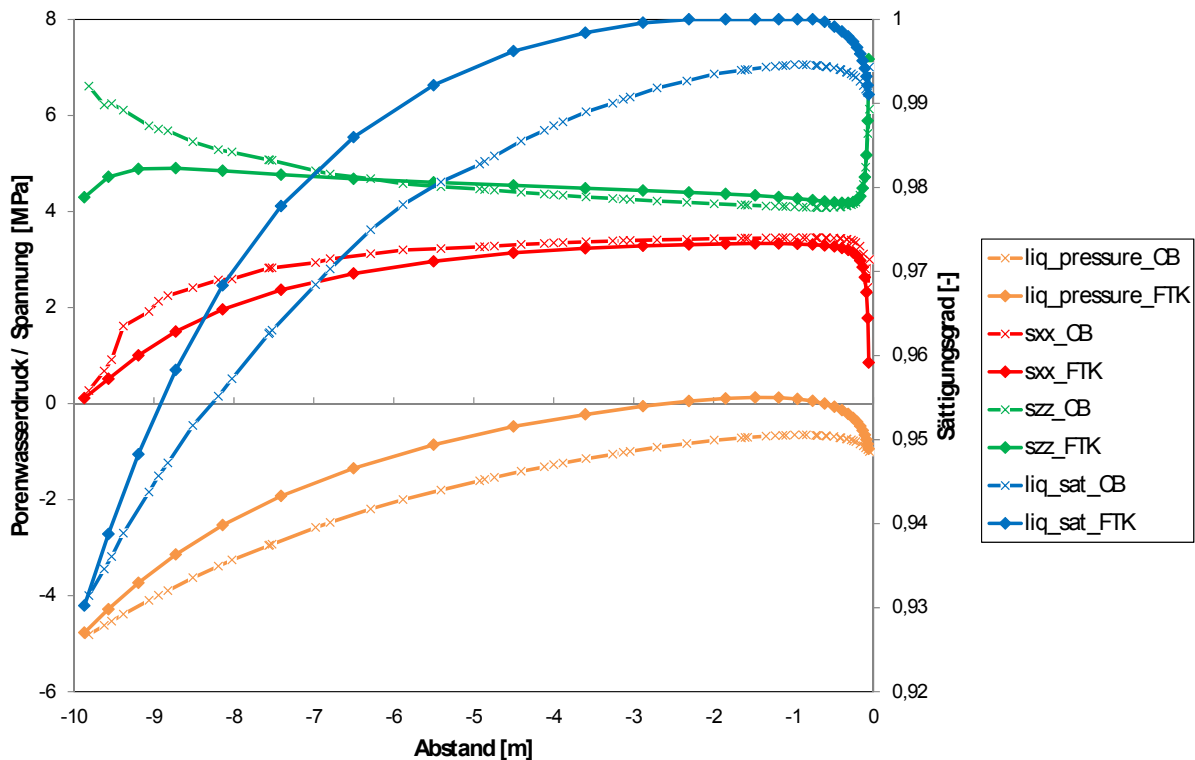


Bild 7.18: Gegenüberstellung der mittels der zwei Simulatoren FTK und CODE_BRIGHT generierten Zustandsgrößen Porenwasserdruck (orangefarbene Graphen), Horizontalspannung (rote Graphen), Vertikalspannung (grüne Graphen) und Sättigungsgrad des Porenraums (blaue Graphen) zum Simulationszeitpunkt $t = 487$ d nach der Simulation des Bohrlochabteufens und somit $t = 5961$ d nach der Auf-fahrung der Strecke entlang eines $d = 10$ m langen, horizontalen Schnittes von der Streckenkontur zur Bohrlochkontur

Während der teilgesättigte Gebirgsbereich sich entsprechend der Resultate der mit dem Simulator CODE_BRIGHT durchgeführten Berechnungen bereits zum Simulationszeitpunkt $t = 15$ a nach der Simulation des Ausbruchs des Streckenabschnitts bis zur Position des Observationsbohrlochs DMB-B1 bei $x = 0$ m ausgebreitet hat – zu entnehmen aus den Verläufen der Zahlenwertegraphen der Sättigungsgrade und der Porenwasserdruckverteilung im Diagramm in Bild 7.17 – ist in Bild 7.18 zu betrachten, wie sich der teilgesättigte Gebirgsbereich um die Gallery 98 herum gemäß der Resultate der numerischen Berechnungen unter Verwendung des FTK-Simulators in den 487 Tagen nach der Simulation des Bohrlochabteufens noch einige Dezimeter weiter in das Gebirge hinein ausbreitet, sodass der Rand des teilgesättigten Gebirgsbereiches gegen Ende des Simulationszeitraums die Position $x = -2,7$ m entlang des Horizontalschnitts erreicht. Des Weiteren kann dem Verlauf der Zahlenwertegraphen der Sättigungsgrade und der Porenwasserdruckverteilung entnommen werden, wie sich im betrachteten Simulationszeitraum nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 auch für

die mittels des FTK-Simulators generierten Berechnungsergebnisse ein teilgesättigter Gebirgsbereich um das Observationsbohrloch DMB-B1 herum ausbildet. Der teilgesättigte Gebirgsbereich um das Observationsbohrloch DMB-B1 herum reicht entlang des Horizontalschnittes bis zur Position $x \approx -9,3$ m, sodass gemäß der Simulationsergebnisse der Berechnung mittels des FTK-Simulators der vollständig wassergesättigte Gebirgsbereich zwischen der Gallery 98 und dem Observationsbohrloch DMB-B1 zum Ende des Simulationszeitraums in Richtung des Horizontalschnitts eine Ausdehnung von $\Delta x \approx 2,0$ m besitzt.

Bezüglich der hydraulischen Gesamtsituation im Gebirgsbereich zwischen den zwei modellierten untertägigen Hohlräumen besteht somit der Hauptunterschied zwischen den mittels des FTK-Simulators und den mittels des Simulators CODE_BRIGTH generierten Berechnungsergebnissen neben der Tatsache, dass die mittels des FTK-Simulators generierten Sättigungsgrade und Porenwasserdrücke durchgängig oberhalb der mittels des Simulators CODE_BRIGTH berechneten Sättigungsgrade und Porenwasserdrücke liegen, darin, dass die mittels des Simulators CODE_BRIGTH durchgeführte numerische Simulation zu dem Ergebnis eines vollständig teilgesättigten Gebirges zwischen der Gallery 98 und dem Observationsbohrloch DMB-B1 führt, während gemäß der mittels des FTK-Simulators generierten Berechnungsergebnisse zum Ende des Simulationszeitraums ein $\Delta x \approx 2,0$ m breiter vollständig wassergesättigter Gebirgsbereich erhalten bleibt.

Bezüglich der zwei geomechanischen Zustandsgrößen *Horizontalspannungen* und *Vertikalspannungen* ist anzumerken, dass sich, wie vorangehend bereits ausführlich beschrieben worden ist, die Verläufe der Zahlenwertgraphen der Horizontalspannungen und Vertikalspannungen im Umfeld der Gallery 98 mit ihrer nicht kreisrunden Hohlraumkontur deutlich voneinander unterscheiden. Dagegen weisen die Zahlenwertgraphen der Horizontalspannungen und Vertikalspannungen in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 mit seiner vergleichsweise einfachen kreisrunden Hohlraumkontur grundsätzlich zueinander ähnliche Verläufe auf, bei denen die jeweiligen Minimal- bzw. Maximalwerte unmittelbar an der Bohrlochkontur erreicht werden. Die Tatsache, dass die für die am Bohrlochrand gelegene Zone mittels des FTK-Simulators berechnete Horizontalspannung mit einem Zahlenwert von $\sigma_h \approx 0,9$ MPa um $\Delta\sigma_h \approx 1,2$ MPa unterhalb der mittels des Simulators CODE_BRIGTH berechneten Horizontalspannungen von $\sigma_h \approx 2,1$ MPa liegt, ist höchstwahrscheinlich auf Diskretisierungsunterschiede zwischen den beiden unterschiedlichen zur Anwendung gekommenen und in Bild 7.3 und Bild 7.4 in Abschnitt 7.3 zu betrachtenden Modellen zurückzuführen.

Etwas geringer als für die berechneten Horizontalspannungen stellen sich die Ergebnisdifferenzen zwischen den mit den beiden unterschiedlichen Simulatoren für den Bohrlochrandbereich berechneten Vertikalspannungen dar. Während die mittels des FTK-Simulators für die Zone im Bohrlochrandbereich berechnete Vertikalspannung $\sigma_v \approx 7,0$ MPa beträgt, ist die mittels des Simulators CODE_BRIGTHT berechnete Vertikalspannung mit einem Zahlenwert von $\sigma_v \approx 7,2$ MPa nur geringfügig größer.

Nach der vergleichenden Gegenüberstellung der vier unterschiedlichen geomechanisch-geohydraulischen Zustandsgrößen im Horizontalschnitt zwischen den beiden modellierten untertägigen Hohlräumen erfolgt nachfolgend zum Abschluss des Vergleichs der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Berechnungsergebnisse die Gegenüberstellung der vier Zustandsgrößen entlang des unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 vertikal in das Gebirge hinein verlaufenden Schnittes.

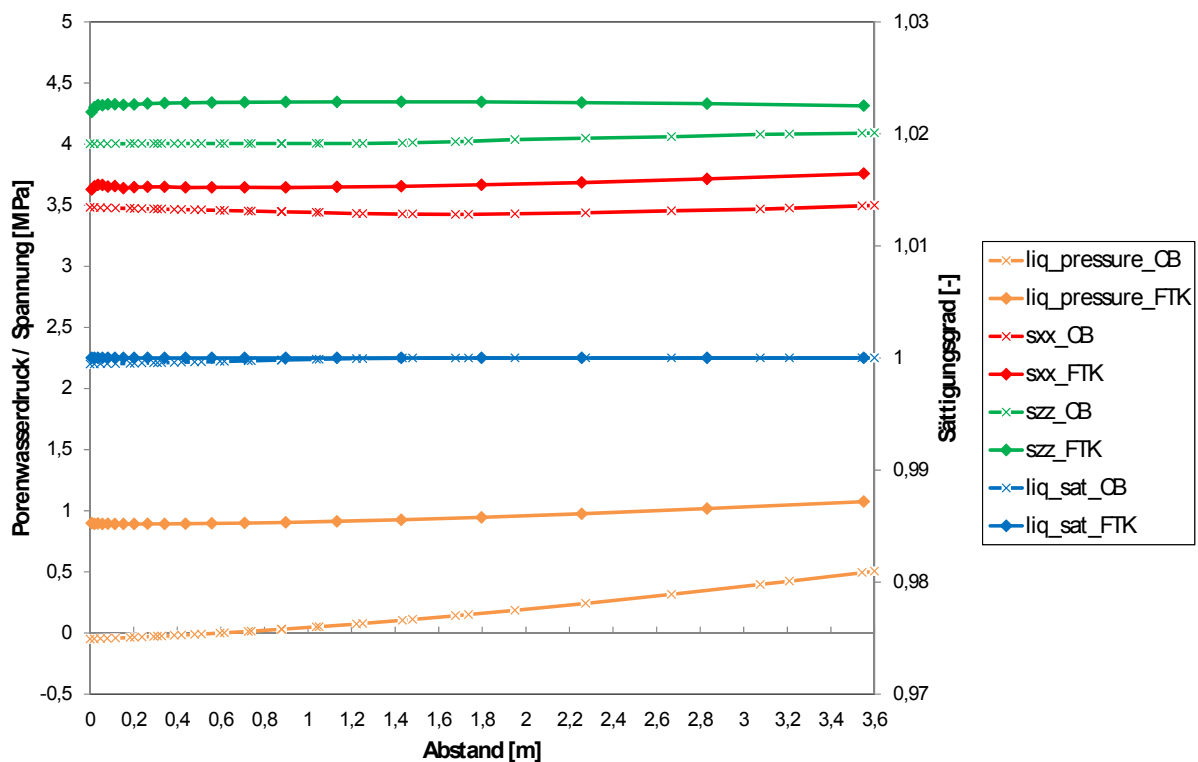


Bild 7.19: Gegenüberstellung der mittels der zwei Simulatoren FTK und CODE_BRIGHT generierten Zustandsgrößen Porenwasserdruck (orangefarbene Graphen), Horizontalspannung (rote Graphen), Vertikalspannung (grüne Graphen) und Sättigungsgrad des Porenraums (blaue Graphen) zum Simulationszeitpunkt $t = 15$ a nach der Auffahrung der Strecke und somit unmittelbar vor der Simulation des Bohrlochabteufens entlang eines $d = 3,6$ m langen, vertikalen Schnittes unterhalb der Bohrlochkontur

Analog zur vorangehenden Gegenüberstellung der Berechnungsergebnisse im Horizontalschnitt erfolgt in Bild 7.19 zunächst die Gegenüberstellung der mittels des FTK-Simulators und des Simulators CODE_BRIGTH berechneten Zustandsgrößen zum Simulationszeitpunkt $t = 15$ a nach der Simulation des Ausbruchs des Streckenquerschnitts und unmittelbar vor der Simulation des Bohrlochabteufens.

Die Zahlenwertegraphen der Vertikalspannungen und Horizontalspannungen weisen für den hier betrachteten Simulationszeitpunkt unmittelbar vor der Simulation des Bohrlochabteufens den erwartungsgemäß monotonen Verlauf auf und zeigen mit ihren nahezu horizontalen Verläufen eine gleichmäßige Verteilung sowohl der Horizontalspannungen wie auch der Vertikalspannungen an. Lediglich die mittels des FTK-Simulators berechneten Horizontalspannungen weisen mit zunehmendem Abstand vom Ausgangspunkt des betrachteten Vertikalschnitts unterhalb der Kontur des zu diesem Simulationszeitpunkt noch nicht abgeteufte Observationsbohrlochs DMB-B1 einen leichten Anstieg von einem Zahlenwert von $\sigma_h \approx 3,7$ MPa am Ausgangspunkt des Vertikalschnitts auf einen Zahlenwert von $\sigma_h \approx 3,8$ MPa am Endpunkt des Vertikalschnitts in einer Entfernung von $\Delta x = 3,6$ m von der zukünftigen Bohrlochkontur auf. Eine mögliche Erklärung für einen Anstieg einer der Spannungskomponenten entlang des Vertikalschnitts ist die Tatsache, dass mit zunehmender Entfernung von der Bohrlochkontur auch die Entfernung zur Kontur der Gallery 98 ansteigt, wie der Betrachtung von Bild 7.3 und Bild 7.4 in Abschnitt 7.3 zu entnehmen ist, was wiederum bedeuten würde, dass sich in der Darstellung der mittels des FTK-Simulators generierten Horizontalspannungen in Bild 7.19 der mechanische Einfluss der Gallery 98 auf die unmittelbare Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 widerspiegelt. Die mittels des Simulators CODE_BRIGTH berechneten Horizontalspannungen liegen entlang des gesamten Vertikalschnitts nahezu konstant bei einem Zahlenwert von $\sigma_h \approx 3,5$ MPa und ändern somit ihren Zahlenwert nicht in Abhängigkeit von der Entfernung zur Kontur der Gallery 98. Auch die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Vertikalspannungen weisen zum betrachteten Simulationszeitpunkt unabhängig von der betrachteten Position entlang des Vertikalschnitts konstante Zahlenwerte auf. Mittels des FTK-Simulators wurde für die Vertikalspannungen entlang des Vertikalschnitts ein konstanter Zahlenwert von $\sigma_v \approx 4,2$ MPa ermittelt und die Berechnung mittels des Simulators CODE_BRIGTH ergab für die Vertikalspannungen entlang des Vertikalschnitts zum Simulationszeitpunkt unmittelbar vor dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 einen konstanten, dem als isotrop angenommenen Primärspannungszustand entsprechenden Zahlenwert von $\sigma_v \approx 4,0$ MPa.

Während aus den im Diagramm in Bild 7.19 dargestellten mechanischen Zustandsgrößen ein mechanischer Einfluss der Gallery 98 auf das Gebirge in der unmittelbaren Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 nur bedingt heraus interpretierbar ist, ist anhand der dargestellten Porenwasserdruckverteilungen und in eingeschränktem Maße auch anhand der dargestellten Sättigungsgrade ein hydraulischer Einfluss der Gallery 98 auf den betrachteten Gebirgsbereich klar zu erkennen. Während die mittels des FTK-Simulators berechneten Porenwasserdrücke entlang des betrachteten Vertikalschnitts mit zunehmender Entfernung zur Gallery 98 von einem Zahlenwert von $PP \approx 0,9$ MPa bei einer Position von $x = 0$ m zu Beginn des Vertikalschnitts auf einen Zahlenwert von $PP \approx 1,1$ MPa bei einer Position von $x = 3,6$ m am Ende des betrachteten Vertikalschnitts anwachsen, steigen die mittels des Simulators CODE_BRIGTH berechneten Porenwasserdrücke sogar von einem negativen Porenwasserdruck mit einem Zahlenwert von $PP \approx -0,1$ MPa am Beginn des betrachteten Vertikalschnitts auf einen positiven Zahlenwert von $PP \approx 0,5$ MPa am Ende des Vertikalschnitts an. Der mittels des Simulators CODE_BRIGTH berechnete Zahlenwertgraph der Porenwasserdruckverteilung zeigt somit zum einen einen weitaus größeren hydraulischen Einfluss der in $d = 10$ m Entfernung positionierten Gallery 98 auf den hier betrachteten, unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 gelegenen Gebirgsbereich an und verdeutlicht zum anderen mit der berechneten Porenwasserdruckdifferenz von $\Delta PP \approx 0,6$ MPa entlang des $l = 3,6$ m langen Vertikalschnitts den signifikanten Einfluss der Berücksichtigung der schichtflächenbedingten hydraulischen Anisotropie des Opalinustons auf die berechnete Porenwasserdruckverteilung. Da in den FTK-Simulator zum Zeitpunkt der Durchführung der hier vorgestellten Berechnungen die Möglichkeit zur Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen unter Berücksichtigung einer hydraulischen Anisotropie noch nicht implementiert gewesen ist, konnte die bedingt durch die Anordnung der Schichtflächen deutlich gegenüber der Permeabilität in horizontaler Richtung abgeminderte Permeabilität des Gebirges in vertikaler Richtung nicht bei der Strömungssimulation mittels des FTK-Simulators berücksichtigt werden. Daher beträgt die mittels des FTK-Simulators entlang des $l = 3,6$ m langen Vertikalschnitts berechnete Porenwasserdruckdifferenz nur $\Delta PP \approx 0,2$ MPa und weist somit einen deutlich geringeren Zahlenwert auf als die mit dem Simulator CODE_BRIGTH berechnete Porenwasserdruckdifferenz.

Da bis zu dem hier betrachteten Simulationszeitpunkt $t = 15$ a nach der Simulation des Ausbruchs der Gallery 98 für die Berechnungen unter Verwendung des FTK-Simulators mit dem größeren der beiden in Tabelle 7.1 in Abschnitt 7.3 angegebenen Zahlenwerte für die hydrau-



lischen Permeabilitäten von $k_{f//} = 2 \cdot 10^{-12}$ m/s gerechnet worden ist, ist es umso bemerkenswerter, dass die mittels des FTK-Simulators ermittelten Porenwasserdrücke deutlich oberhalb der unter Verwendung des Simulators CODE_BRIGTH berechneten Porenwasserdrücke liegen. Es wäre zu erwarten, dass die unter Verwendung des FTK-Simulators berechnete Porenwasserdruckabsenkung zum betrachteten Simulationszeitpunkt $t = 15$ a insgesamt weiter vorangeschritten ist als die unter Verwendung des Simulators CODE_BRIGTH mit der Berücksichtigung einer in der Vertikalen deutlich abgeminderten hydraulischen Durchlässigkeit mit einem Zahlenwert von $k_{f\perp} = 5 \cdot 10^{-13}$ m/s berechnete Porenwasserdruckabsenkung im die Gallery 98 umgebenden Gebirge.

Neben der Darstellung der ermittelten Porenwasserdrücke zeigt auch die Darstellung der mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Sättigungsgrade, dass, während im Rahmen der unter der Verwendung des FTK-Simulators durchgeführten numerischen Simulation eine vollständige Wassersättigung des betrachteten Gebirgsbereich zum betrachteten Simulationszeitpunkt $t = 15$ a nach der Simulation des Streckenausbruchs berechnet worden ist, die unter Verwendung des Simulators CODE_BRIGTH erhaltenen Simulationsergebnisse die Ausbildung eines teilgesättigten Gebirgsbereiches mit einer Ausdehnung bis zu einer Position von $x \approx 0,5$ m in das Gebirge hinein anzeigen. Am weitesten ist die Entsättigung des Gebirges gemäß der unter Verwendung des Simulators CODE_BRIGTH ermittelten Berechnungsergebnisse konsequenterweise im am dichtesten an der Gallery 98 gelegenen Gebirgsbereich bei einer Position von $x = 0$ m vorangeschritten. Passend zu den betragsmäßig nur sehr geringen negativen Porenwasserdrücken von $PP \approx -0,1$ MPa beträgt der Sättigungsgrad des Gebirges gemäß der mittels des Simulators CODE_BRIGTH generierten Berechnungsergebnisse am Beginn des Vertikalschnitts $S \approx 99,9$ %.

Wie in Abschnitt 7.3 bereits beschrieben worden ist, ist für die numerischen Simulationen unter Verwendung des FTK-Simulators für die Simulation der Strömung im Simulationszeitraum zwischen dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 und dem Ende des Simulationszeitraums zum Zeitpunkt $t = 487$ d nach dem Abteufen des Observationsbohrlochs DMB-B1 die niedrigere der beiden hydraulischen Durchlässigkeiten mit einem Zahlenwert von $k_{f\perp} = 5 \cdot 10^{-13}$ m/s verwendet worden, während für die mittels des Simulators CODE_BRIGTH durchgeführte Berechnung weiterhin die hydraulische Anisotropie des Opalinuston unter Verwendung beider hydraulischer Permeabilitäten berücksichtigt worden ist. Die Verteilung der vier unter Verwendung der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten

ausgewählten Zustandsgrößen entlang des Vertikalschnitts zum Simulationszeitpunkt $t = 487$ d unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 können im Diagramm in Bild 7.20 betrachtet werden.

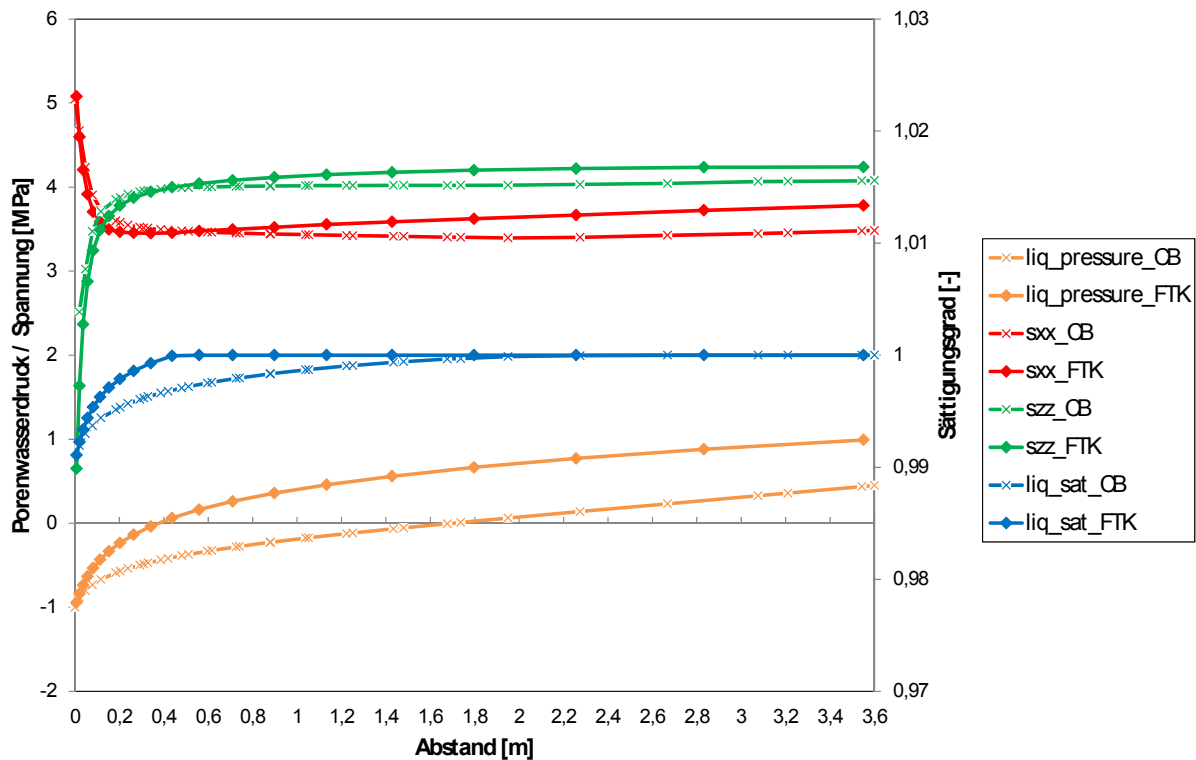


Bild 7.20: Gegenüberstellung der mittels der zwei Simulatoren FTK und CODE_BRIGHT generierten Zustandsgrößen Porenwasserdruck (orangefarbene Graphen), Horizontalspannung (rote Graphen), Vertikalspannung (grüne Graphen) und Sättigungsgrad des Porenraums (blaue Graphen) zum Simulationszeitpunkt $t = 487$ d nach der Simulation des Bohrlochabteufens und somit $t = 5961$ d nach der Auf-fahrung der Strecke entlang eines $d = 3,6$ m langen, vertikalen Schnittes unterhalb der Bohrlochkontur

Bezüglich der zum Simulationszeitpunkt $t = 487$ d nach der Simulation des Bohrlochabteufens berechneten mechanischen Zustandsgrößen lässt sich eine relativ gute Übereinstimmung zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Berechnungsergebnissen feststellen. Während sich in den weit unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 gelegenen Gebirgsbereichen bedingt durch das Bohrlochabteufen und die anschließend bis zum Ende des Simulationszeitraums andauernde Strömungsphase keine signifikanten Veränderungen der mechanischen Zustandsgrößen ergeben, wie einem Vergleich der Diagramme in Bild 7.19 und Bild 7.20 entnommen werden kann, fallen die Vertikalspannungen unmittelbar an der Bohrlochkontur erwartungsgemäß stark ab, während die Horizontalspannungen eben-

falls erwartungsgemäß stark ansteigen. Mit maximalen Zahlenwerten geringfügig oberhalb von $\sigma_h = 5,0$ MPa ähneln sich die unter Verwendung der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Zahlenwertegraphen der Horizontalspannungen qualitativ und quantitativ stark. Auch für die mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Zahlenwertegraphen der Vertikalspannungen besteht, wie der Betrachtung des Diagramms in Bild 7.20 entnommen werden kann, qualitativ eine große Übereinstimmungen. Lediglich die in der unmittelbar an der Bohrlochkontur gelegenen Gebirgszone mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten minimalen Vertikalspannungen unterscheiden sich mit Zahlenwerten von $\sigma_v \approx 0,7$ MPa für die Berechnung mittels des FTK-Simulators und von $\sigma_v \approx 2,5$ MPa für die Berechnungen mittels des Simulators CODE_BRIGTH quantitativ mit einer zahlenmäßigen Differenz von $\Delta\sigma_v \approx 1,8$ MPa deutlich voneinander. Wie bereits bei der Diskussion der im Diagramm in Bild 7.18 zu betrachtenden Simulationsergebnisse für den Horizontalschnitt zwischen Gallery 98 und dem Observationsbohrloch DMB-B1 erwähnt wird, sind die quantitativen Ergebnisunterschiede zwischen den ansonsten qualitativ gut übereinstimmenden berechneten mechanischen Zustandsgrößen höchstwahrscheinlich auf Diskretisierungsunterschiede zwischen den beiden unterschiedlichen zur Anwendung gekommenen und in Bild 7.3 und Bild 7.4 in Abschnitt 7.3 zu betrachtenden Modellen zurückzuführen.

Wie vorangehend ebenfalls bereits bei der Diskussion der im Diagramm in Bild 7.18 dargestellten ausgewählten mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Zustandsgrößen festgestellt wird, verdeutlicht sich auch bei der Betrachtung der im Diagramm in Bild 7.20 dargestellten vier ausgewählten Zustandsgrößen, dass im Gebirge in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 deutlich größere Ergebnisunterschiede bezüglich der generierten hydraulischen Zustandsgrößen als zwischen den berechneten mechanischen Zustandsgrößen bestehen. Während im unmittelbaren Bohrlochrandbereich für beide zur Anwendung gekommenen Simulatoren die negativen Porenwasserdrücke entsprechend der vorgegebenen Randbedingungen $PP_{RB} = -1,0$ MPa betragen und die Sättigungsgrade dementsprechend mit Zahlenwerten von $S \approx 99,1$ % an der Hohlraumkontur ebenfalls für beide verwendeten Simulatoren identisch sind, unterscheiden sich die betrachteten hydraulischen Zustandsgrößen zum Simulationszeitpunkt $t = 487$ d nach dem Bohrlochabteufen in den weiteren betrachteten Gebirgsbereichen unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 signifikant voneinander, was nach den vorangehenden Ausführungen im Rahmen der Diskussion der im Diagramm in Bild 7.19 dargestellten, zum Simulationszeitpunkt $t = 15$ a berechneten hydraulischen Zustandsgrößen auch zu erwarten gewesen ist. Während der teilgesättigte Gebirgsbe-



reich sich gemäß der unter Verwendung des FTK-Simulators berechneten Zahlenwertegraphen der Sättigungsgrade und der Porenwasserdruckverteilung bis zu einer Position von $x = 0,56$ m unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 in das Gebirge hinein ausbreitet, wie vorangehend bereits in Abschnitt 7.5 erwähnt wird und wie dort sehr gut im Rahmen der Darstellung der berechneten Kapillarspannungen in Bild 7.16 zu betrachten ist, lassen die zwei Zahlenwertegraphen der unter Verwendung des Simulators CODE_BRIGTH berechneten Sättigungsgrade und Porenwasserdrücke auf eine Ausbreitung des teilgesättigten Gebirgsbereiches bis zu einer Position von $x = 1,8$ m unterhalb des Observationsbohrlochs DMB-B1 schließen. Der teilgesättigte Gebirgsbereich, der sich innerhalb des gesamten Observationszeitraums um das Observationsbohrloch DMB-B1 herum ausbildet, ist somit gemäß der Berechnung unter Verwendung des Simulators CODE_BRIGTH ca. dreimal so groß wie der unter Verwendung des FTK-Simulators berechnete teilgesättigte Gebirgsbereich. Passend zu den deutlichen Unterschieden bezüglich der berechneten Ausdehnung des teilgesättigten Gebirgsbereiches ergeben sich auch große quantitative Unterschiede bezüglich der berechneten Porenwasserdrücke. Während der unter Verwendung des FTK-Simulators berechnete Porenwasserdruck am Ende des betrachteten Vertikalschnitts bei einer Position von $x = 3,6$ m einen Zahlenwert von $PP \approx 0,9$ MPa aufweist, beträgt der für dieselbe Position im Gebirge unter Verwendung des Simulators CODE_BRIGTH berechnete Porenwasserdruck nur $PP \approx 0,4$ MPa.

7.7 Fazit zur Gegenüberstellung der mit den beiden Simulatoren FTK und CODE_BRIGTH generierten Berechnungsergebnisse

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass zwischen den mittels des FTK-Simulators und den mittels des Simulators CODE_BRIGTH generierten Sättigungsgraden des Gebirges und zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Porenwasserdruckverteilungen signifikante Unterschiede bestehen. Somit verdeutlicht der im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführte Ergebnisvergleich die dringende Notwendigkeit einer weiteren Befassung mit der Thematik der Simulation des Zweiphasenflusses in porösen Medien, wobei einer der Schwerpunkte unbedingt auf der Durchführung weiterer Benchmark-Untersuchungen liegen sollte. Hierbei erscheint für die Zukunft sowohl die Durchführung weiterer Vergleichsberechnungen zwischen dem FTK-Simulator und dem Simulator CODE_BRIGTH zur Ergründung der Ursachen für die identifizierten Ergebnisdifferenzen sinn-



voll wie darüber hinaus auch die Miteinbeziehung weiterer numerischer Simulationsinstrumentarien in weitere Benchmark-Untersuchungen.

Aufgrund der Komplexität des Aufgabenfeldes der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulation von Gebirgstrag- und Gebirgsdeformationsverhalten unter der Annahme der Ausbildung eines Zwei- oder Mehrphasenflusses in den Porenräumen des Gebirges empfiehlt sich eine umsichtige Vorgehensweise, bei der die Komplexität der numerisch abzubildenden Prozesse ausgehend von einer möglichst einfachen Aufgabenstellung nur schrittweise gesteigert werden sollte. Nicht zuletzt aufgrund der vorangehend im vorliegenden Abschnitt identifizierten Ergebnisdifferenzen zwischen den mittels dem FTK-Simulator und dem Simulator CODE_BRIGTH berechneten numerischen Ergebnissen erscheint für weitere Benchmarks eine schrittweise Vorgehensweise ratsam. Die einzelnen Schritte eines in Zukunft durchzuführenden Benchmarks mit Fokus auf Zweiphasenflussprozessen sollten folgendermaßen gestaltet sein:

- (1) Durchführung von Berechnungen zum ungekoppelten mechanischen Verhalten des betrachteten untertägigen Tragsystems. Im ersten Schritt ist es sinnvoll, hierbei ein lediglich linear-elastisches Materialverhalten für das numerisch zu simulierende Gebirgsverhalten anzusetzen. Ist es Ziel der Benchmark-Untersuchungen, auch komplexere Materialeigenschaften wie beispielsweise elasto-plastisches oder elastisch-viskoplastisches Materialverhalten zu untersuchen, so sollten numerische Berechnungen unter Verwendung der entsprechenden Stoffmodelle unbedingt auch zunächst nur mechanisch ohne den Ansatz eines Porenwasserdruckes durchgeführt werden.
- (2) Durchführung von Berechnungen zum ungekoppelten hydraulischen Verhalten des Tragsystems (H^2 -Prozesse) unter der Annahme einer vollständigen hydraulischen Isotropie des Gebirges.
- (3) Durchführung von Berechnungen zum ungekoppelten hydraulischen Verhalten des Tragsystems (H^2 -Prozesse) unter der Annahme einer hydraulischen Anisotropie des Gebirges.
- (4) Durchführung von Berechnungen zum hydraulisch-mechanisch gekoppelten Tragverhalten (H^2M -Prozesse) unter der Annahme einer vollständigen hydraulischen Isotropie des Gebirges. Bei der Betrachtung mehrerer unterschiedlicher mechanischer Materialeigenschaften sollte auch für die hydraulisch-mechanisch gekoppelte Analyse zunächst von einem linear-elastischen Materialverhalten des Gebirges ausgegangen wer-



den, bevor in weiteren Berechnungsläufen komplexere Stoffmodelle in die Analyse miteinbezogen werden.

- (5) Durchführung von Berechnungen zum hydraulisch-mechanisch gekoppelten Tragverhalten unter der Annahme einer hydraulischen Anisotropie des Gebirges. Zum Umgang mit mehreren unterschiedlichen Stoffmodellen zur Abbildung des mechanischen Materialverhaltens ist die gleiche Vorgehensweise zu wählen wie unter (4) beschrieben.

Im Anschluss an jeden der einzelnen empfohlenen Schritte sollte eine vergleichende Gegenüberstellung der mittels der beteiligten Simulatoren generierten Ergebnisse erfolgen und erst nach dem Erreichen einer im Hinblick auf die Zielsetzung der durchgeführten Untersuchungen als hinreichend zu erachtenden Übereinstimmung der Ergebnisse sollte mit dem nächsten Benchmark-Schritt fortgefahren werden.

Des Weiteren sollte ein Benchmarktest zunächst an einem in Bezug auf seine Geometrie sowie in Bezug auf die vorherrschenden gebirgsmechanischen Bedingungen möglichst einfachen Modell durchgeführt werden. Hierzu kann zunächst wahlweise ein generisches Modell oder ein stark vereinfachendes Modell eines in situ zu untersuchenden untertägigen Tragsystems verwendet werden. Erst im Anschluss an die im Hinblick auf die Ergebnisgegenüberstellung erfolgreiche Durchführung der Benchmark-Untersuchungen nach der vorangehend beschriebenen Vorgehensweise an einem einfachen und am besten auch analytisch nachvollziehbaren Beispiel sollten komplexere in situ-Systeme zur Validierung der Simulationsinstrumentarien in Betracht gezogen werden.

Die Durchführung der in situ-Untersuchungen in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 haben aufgezeigt, dass die innerhalb der Niche MI des URL Mont Terri vorherrschende geomechanisch-geohydraulische Gesamtsituation mit den sich überlagernden Einflussbereichen mehrerer zum Teil unterschiedlich alter Hohlräume sowie den unterschiedlichen Faziesbereichen und den damit verbundenen Faziesübergängen zu einem sehr komplexen geomechanisch-geohydraulisch gekoppelten Verhalten des Gebirges in der Umgebung der Observationsbohrlöcher geführt hat.

Die geomechanische und geohydraulische Komplexität der gebirgsmechanischen Situation in der Umgebung der Observationsbohrlöcher hat zu einem numerisch nur sehr schwer abzubildenden in situ beobachteten hydraulischen Verhalten des Gebirges in der Umgebung des Observationsbohrlochs DMB-B1 geführt. Darüber hinaus ist in den Observationsbohrlöchern



DMB-B1 bis DMB-B4 ein ebenfalls der Komplexität der geomechanischen Gesamtsituation geschuldetes sehr komplexes Trag- und Deformationsverhalten mit zahlreichen nicht erkennbar systematisch und eher unregelmäßig innerhalb der Observationsbohrlöcher auftretenden Versagensmechanismen wie beispielsweise Bohrlochwandabschalungen, Gesteinsabplatzungen aus der Bohrlochwand heraus oder durch lokal begrenzte Porenwasserzutritte bedingte Gesteinsaufweichungen mit einhergehenden Bohrlochkonturveränderungen beobachtet worden. Bezüglich ihrer realitätsnahen Abbildbarkeit durch die Anwendung von auf kontinuumsmechanischen Grundsätzen aufbauenden numerischen Simulatoren wie FLAC^{3D} oder eben dem FTK-Simulator stellen derartige Phänomene eine große Herausforderung dar.

Daher erscheint es sinnvoll, in Zukunft zur weiteren Validierung des FTK-Simulators sowie zur weiteren Validierung anderer im Rahmen von Benchmarktests eingesetzter Simulatoren Messergebnisse aus geomechanisch weniger komplexen Gebirgsbereichen als dem im Rahmen dieses Vorhabens untersuchten Gebirgsbereich zu generieren. Denkbar wäre beispielsweise ein Bohrlochquerschnitt außerhalb des geomechanischen Einflussbereichs jeglicher Strecken und in deutlichem Abstand zu sämtlichen Faziesübergängen. Ein solcher Bohrlochquerschnitt, der in einem Abstand von $d > 30$ m zur Strecke und somit näherungsweise im mechanischen Fernfeld liegen sollte, konnte im Rahmen dieses Vorhabens nicht untersucht werden, da

- (1) der Schwerpunkt der Felduntersuchungen zunächst auf einer weiteren Erkundung der gebirgsmechanisch komplexen Niche MI im Rahmen der Fortsetzung der in *Lux & Seeska (2010)* begonnenen Untersuchungen gelegen hat,
- (2) das Abteufen von weiteren Bohrlöchern in eine Teufe von $t_{BL} > 30$ m sowie die Installation der Porenwasserdruckaufnehmer in einer derartigen Teufe mit sehr großem technischen und damit auch finanziellem Aufwand verbunden gewesen wäre und
- (3) es darüber hinaus innerhalb des URL Mont Terri bei den in situ gegebenen Bedingungen äußerst schwierig ist, die Zugänglichkeit eines so tief innerhalb eines Bohrlochs gelegenen Observationsquerschnitts über mehrere Monate hinweg zu gewährleisten.

Trotz des vorangehend beschriebenen erhöhten Aufwands zur Generierung von Observationsdaten zum geomechanischen und geohydraulischen Verhalten von Observationsbohrlöchern aus tiefer im Gebirge gelegenen und somit weniger stark durch andere Hohlräume beeinflussten Gebirgsbereichen ist es zur weiteren Validierung des FTK-Simulators und auch anderer Simulationsinstrumentarien unbedingt erforderlich, derartige in situ-Messdaten aus



mechanisch und hydraulisch soweit wie möglich unbeeinflussten Gebirgsbereichen zu generieren, um einen Vergleich mit den Simulationsergebnissen zu ermöglichen. Messdaten zur Validierung des FTK-Simulators können darüber hinaus aus Datensätzen entnommen werden, wie sie im Rahmen von internationalen Projekten wie beispielsweise DECOVALEX-THMC gewonnen werden oder wie sie derzeit im Rahmen des FE-Experimentes im URL Mont Terri generiert werden.

Bevor weitere Validierungsarbeiten vorgenommen werden, sollte der FTK-Simulator weiter entwickelt werden, um die im Rahmen der durchgeführten und im vorliegenden Abschnitt sowie darüber hinaus in Abschnitt 6.4.3 beschriebenen numerischen Simulationsarbeiten als notwendig identifizierten Erweiterungen in den Programmcode zu integrieren. Die identifizierten notwendigen Erweiterungen werden abschließend noch einmal explizit aufgelistet und sind wie folgt zu benennen:

- (1) Entwicklung einer Programmroutine, die es erlaubt, nicht *Voronoi*-artige Diskretisierungsstrukturen programmintern derart zu verarbeiten, dass sie im Anschluss eine Strömungssimulation mit dem FTK-Simulator ermöglichen, die nicht zu diskretisierungsbedingten Differenzen zwischen der mit dem FTK-Simulator und der mit dem Simulator FLAC^{3D} berechneten Porenwasserdruckverteilung führt.
- (2) Erweiterung des FTK-Simulators um ein optional einsetzbares Kriterium zur Steuerung des hydraulischen Zeitschritts, sodass in Zukunft der erfahrene Anwender die Zeitschrittsteuerung individuell an gegebene Erfordernisse anpassen kann, aber gleichzeitig auch der im Umgang mit dem FTK-Simulator unerfahrenere Anwender die Möglichkeit zur sicheren Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen erhält.
- (3) Integration der Option zur Berücksichtigung einer hydraulischen Anisotropie des Gebirges in den FTK-Simulator, da entsprechend den vorangehenden Ausführungen im vorliegenden Abschnitt die Berücksichtigung der schichtungsgefügebedingten Anisotropie bezüglich der hydraulischen Leitfähigkeit zur realitätsnäheren Abbildung von Porenwasserdruckabsenktrichtern im Gebirge sowie von entsättigten Gebirgsbereichen in der Umgebung von untertägigen Hohlräumen in Tongesteinsformationen aufgrund des stets vorhandenen Schichtflächengefüges zwingend erforderlich ist.



8 Vorbereitungen für einen organisationsübergreifenden Simulatorenvergleich zur Qualitätssicherung

8.1 Motivation und Überblick

Mit dem vorliegenden Bericht ist gezeigt worden, dass es mit dem im Rahmen dieses Forschungsvorhabens entwickelten FTK-Simulator grundsätzlich möglich ist, für ein modelliertes Endlager(teil)system sowohl das mechanische Trag- und Deformationsverhalten unter Berücksichtigung von Porendruck- und Sättigungsvariationen wie auch das durch Gebirgsdeformationen beeinflusste hydraulische Strömungsverhalten numerisch zu analysieren. Die im Rahmen des Vorhabens durchgeführten ersten Validierungsversuche sind im Gegensatz zu den Verifizierungsberechnungen jedoch insbesondere bei Berücksichtigung der eher komplexen Zweiphasenflussprozesse (DM-B-Experiment im URL Mont Terri) noch als ausbaufähig einzustufen. In Ermangelung von analytischen Lösungen hinsichtlich vieler Aspekte der THM- und TH²M-gekoppelten Modellierung erscheint hier jedoch lediglich der Vergleich von Simulationsergebnissen zum selben Modell, die unter Verwendung unterschiedlicher Simulatoren erhalten worden sind, zielführend. Aus dieser Motivation heraus ist die Idee eines organisationsübergreifenden Simulatoren-Benchmarkings entstanden.

Im Forschungsbereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle existieren oder existierten diverse nationale oder internationale Projekte mit der Zielstellung des Vergleichs der rechnerischen Fähigkeiten unterschiedlicher Organisationen wie z.B. zum in situ-Test FEBEX im URL Grimsel (Schweiz), *Alonso et al. (2005)*, das BMBF-Verbundvorhaben „Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen“, *Hampel et al. (2010)*, oder auch das bereits seit 1992 bestehende Projekt DECOVALEX, *Tsang et al. (2009)*, *Hudson & Jing (2013)*. Die Erfahrungen zeigen, dass solche Kooperationsprojekte sowohl den Erfahrungsaustausch zwischen Organisationen unterstützen wie auch neue wissenschaftlichen Erkenntnisse zutage fördern, was durch das langjährige Fortbestehen von mehreren dieser Benchmarking-Projekte nochmals unterstrichen wird. Im Gegensatz zu den vorstehend genannten Projekten soll der Fokus bei dem vom LfD&G geplanten Benchmarking jedoch verstärkt auf die verwendeten Simulatoren der teilnehmenden Organisationen und weniger auf Stoffmodelle oder in situ- bzw. laborative Untersuchungen gerichtet sein, d.h. im Rahmen der Qualitätssicherung bzw. Verbesserung der Prognosefähigkeit eher Verifizierungs- als Validierungscharakter besitzen.

Während der Forschungsarbeiten sind vom LfD&G bereits Kontakte zu weiteren Organisationen geknüpft worden, die sich ebenfalls mit numerischen Simulationen von THM-Prozessen



im Bereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle im Tonstein- und im Salinargebirge befassen und die Interesse an einem Simulatorenvergleich gezeigt haben. Nach weiteren Gesprächen, die im Rahmen einer Laufzeitverlängerung und Aufstockung des ursprünglichen Forschungsvorhabens stattgefunden haben, haben die folgenden fünf in alphabetischer Reihenfolge aufgelisteten Organisationen ihre Absicht zur Teilnahme an dem Simulatorenvergleich mitgeteilt:

- (1) Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover,
- (2) Eidgenössisches Nuklearsicherheitsinspektorat (ENSI), Brugg, Schweiz,
- (3) Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) Braunschweig,
- (4) GRS Köln,
- (5) Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Berkeley, Kalifornien, USA.

Dabei sind auch bereits in einigen Fällen gegenseitige Präsentationen und Demonstrationen der Fähigkeiten der TH²M-Simulatoren, deren Einsatz von der jeweiligen Organisation in dem geplanten Benchmarking beabsichtigt ist, erfolgt. Die Simulatoren, die nach derzeitigem Stand über diese potenziellen Benchmarking-Teilnehmer im Optimalfall für den Vergleich zur Verfügung stünden, wären hierbei:

- FTK-Simulator (vorliegender Forschungsbericht),
- TOUGH-FLAC (*Rutqvist et al., 2002*),
- CODE_BRIGHT (*UPC, 1994/2014*),
- OpenGeoSys (*Kolditz et al., 2012*),
- COMSOL Multiphysics (*COMSOL, 2011*) und
- JIFE (*Faust et al., 2011*).

Der folgende Abschnitt 8.2 gibt einen groben orientierenden Überblick über die Erfahrungen der genannten potenziellen Benchmarking-Teilnehmer mit TH²M-Simulationen und insbesondere mit den genannten Simulatoren. Außerdem sind erste Vorschläge für zu simulierende Benchmarks ausgearbeitet worden, die in Abschnitt 8.3 vorgestellt werden.



8.2 Potenzielle Kooperationspartner und ihre Erfahrungen im Bereich der (T)H²M-Simulation von Endlagerteilsystemen

(1) BGR – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe

Die BGR hat als 1958 aus Vorgängerorganisationen gegründete Bundesbehörde für geowissenschaftliche Untersuchungen und Fragestellungen des Bundes umfangreiche Erfahrungen auch im Fachgebiet der untertägigen Endlagerung radioaktiver Abfälle erarbeitet. Sie ist im Rahmen dieses Fachgebietes in zahlreichen internationalen Forschungsprojekten wie z.B. DECOVALEX und BAMBUS vertreten, *Hudson & Jing (2013)* bzw. *Bechthold et al. (1999, 2004)*, und führt Kooperationen mit Organisationen anderer Staaten zum beiderseitigen Erfahrungsaustausch durch, z.B. *Shao et al. (2011)* (ANDRA, Frankreich) und *Kunz et al. (2013)* (BRIUG, China). Durch den langjährigen Einsatz von unterschiedlichen Finite-Elemente-Simulatoren wie JIFE, OpenGeoSys und ANSALT besteht auch bereits seit Jahrzehnten ein vielschichtiges Know-How im Bereich der numerischen Analysen von untertägigen Hohlräumen im Tonstein- und Salinargebirge, u.a. *Heusermann et al. (2013)* und *Maßmann et al. (2011)*.

Als primärer Ansprechpartner für den geplanten Simulatorenvergleich würde Prof. Dr. Stefan Heusermann fungieren.

(2) ENSI – Eidgenössisches Nuklearsicherheitsinspektorat (Schweiz)

Das ENSI ist die unabhängige schweizerische Aufsichtsbehörde für die Beaufsichtigung der kerntechnischen Anlagen des Staates. Sein Aufsichtsgebiet umfasst neben Projektierung, Bau und Stilllegung von Kernkraftwerken, nuklearen Forschungseinrichtungen und anderen Anlagen auch die Entsorgung radioaktiver Abfälle. In dieser Position ist das ENSI auch damit befasst, die von der schweizerischen Nationalen Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (Nagra) im Auftrag der Abfallverursacher durchgeführten sicherheitstechnischen Auslegungen und Berechnungen für untertägige Endlager zu kontrollieren. In diesem Zusammenhang führt das ENSI auch eigene numerische Überprüfungen der Aussagen zur Nuklidenausbreitung und zur hydraulischen Integrität von Endlagersystemkomponenten durch (→ Sachplan geologische Tiefenlagerung, *Sentís & Leuz, 2012*). Die numerischen Kernkompetenzen der vom LfD&G angesprochenen Sektion Tiefenlagerung und Sicherheitsanalysen liegen dabei im Bereich der chemisch-hydraulisch-thermischen Prozesse. Erfahrungen beste-



hen dort mit den Simulatoren COMSOL Multiphysics, TOUGH2 und OpenGeoSys. Eine verstärkte Befassung mit geomechanischen Aspekten erfolgt seit mehreren Jahren unter Verwendung der Simulatoren OpenGeoSys, beispielsweise im Rahmen des Projektes DECOVALEX-2015, *Graupner et al. (2013)*, und jüngst auch unter Verwendung von FLAC^{3D} bzw. TOUGH-FLAC.

Die erste Ansprechpartnerin hinsichtlich des Benchmarkings wäre auf Seiten des ENSI Dr. Ann-Kathrin Leuz.

(3) GRS BS – Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit Braunschweig

Als unabhängige private Begutachtungsorganisation auf dem Gebiet der nuklearen Sicherheit und Entsorgung ist die GRS seit 1978 tätig und betreibt primär Auftragsforschung für deutsche Bundesministerien und Einrichtungen des Bundes und der Länder. Durch eigene Forschungsarbeiten und Kooperationen mit internationalen Partnern hat sie sich einen großen Erfahrungsschatz sowohl bezüglich von Feld- und Laboruntersuchungen wie auch im Tätigkeitsfeld der numerischen Simulation im Tonstein- und Salinargebirge erarbeitet.

In Braunschweig befindet sich das Endlagerforschungszentrum der GRS. Mit Mitarbeitern des Bereichs Endlagersicherheitsforschung verbinden den LfD&G langjährige Kontakte im Rahmen von wissenschaftlichen Kooperationen in unterschiedlichen Fachgebieten, z.B. *We-runsky et al. (2007)* oder die Kooperation im Rahmen dieses Forschungsvorhabens, *Czai-kowski et al. (2015)*. Numerische Berechnungen zu THM-gekoppelten Analysen im Endlagerungsbereich werden vorwiegend mit dem Programm CODE_BRIGTH durchgeführt, z.B. *Czai-kowski & Wieczorek (2013)*, *Zhang et al. (2004)*.

Ansprechpartner für das anvisierte Kooperationsprojekt wären nach derzeitigem Planungsstand Dr. Jörg Mönig, Klaus Wieczorek und Dr. Oliver Czaikowski.

(4) GRS K – Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit Köln

Mit einer weiteren Forschungsgruppe der GRS sind in jüngerer Zeit ebenfalls Kontakte mit Blick auf einen wissenschaftlichen Erfahrungsaustausch hinsichtlich des Simulators TOUGH2 sowie einer Simulatorverifizierung aufgebaut worden. Der Simulator TOUGH2 ist in dieser Kölner Forschungsgruppe bereits seit vielen Jahren im Einsatz und überdies auch



modifiziert und weiterentwickelt worden, z.B. *Kock et al. (2012) / Navarro (2013)*. Berechnungen mit Berücksichtigung geomechanischer Prozesse werden mit einer eigenständig weiterentwickelten Version des TOUGH-FLAC-Simulators durchgeführt.

Als primärer Ansprechpartner für den Simulatorenvergleich würde Dr. Martin Navarro fungieren, der in der jüngsten Vergangenheit auch bereits wertvolle Hilfestellungen hinsichtlich des Quellcodeverständnisses von TOUGH2 im Rahmen eines informellen Fachtreffens leisten konnte.

(5) LBNL – Lawrence Berkeley National Laboratory (USA)

Die in der Abteilung Hydrogeologie der Erdwissenschaftsdivision des LBNL entwickelten Simulatoren der TOUGH-Familie haben ihren Ursprung im Simulator TOUGH aus den Achtzigerjahren des 20. Jahrhunderts, *Pruess (1987)*, der im Verlauf der Zeit stetig weiterentwickelt worden ist. Diese Weiterentwicklung betrifft sowohl die Anwendungsbereiche des Simulators (Module und Softwarekopplungen, z.B. TOUGH2, *Pruess et al., 1999/2012*, oder TOUGH2-RBSN, *Asahina et al., 2014*) wie auch generelle Codeerweiterungen wie die parallelisierte Version TOUGH2-MP, *Zhang et al. (2008)*, oder der inverse Simulator iTOUGH2 für Parametersensitivitätsanalysen, *Finsterle (2013)*. Hinsichtlich der Softwarekopplung ist TOUGH2 unter anderem zu Beginn dieses Jahrtausends mit dem Simulator FLAC^{3D} zur TH²M-gekoppelten Analyse verschiedenartiger geowissenschaftlicher Prozesse gekoppelt worden, *Rutqvist et al. (2002)*. Der auf diese Weise erhaltene TOUGH-FLAC-Simulator ist seitdem vielfach angewendet und dabei ebenfalls weiterentwickelt worden, z.B. in Form einer TOUGH2+HYDRATE-FLAC^{3D}-Kopplung (*Rutqvist & Moridis, 2008*), zur Modellierung von thermoelastoplastischen Deformationen unter Berücksichtigung von Quellungsprozessen (Stoffmodell *BBM*, *Rutqvist et al., 2011*) oder in jüngerer Zeit im Rahmen einer Kooperation mit dem LfD&G hinsichtlich der Anpassung der Modelldiskretisierung für Simulationen im Salinargebirge (kriechbedingte Geometrieangepassung für TOUGH2, Stoffmodell *Lux/Wolters, Voronoi*-Diskretisierung, *Blanco Martín et al., 2013; Blanco Martín et al., 2014*). Eine Fortführung der Kooperation wird von beiden Seiten aus als fachlich notwendig und lohnenswert erachtet.

Der erste Ansprechpartner für das geplante Benchmarking wäre somit wie in den vergangenen Jahren weiterhin Prof. Dr. Jonny Rutqvist.



8.3 Für den Simulatorenvergleich vorgesehene Beispielmodelle

8.3.1 Zur Auswahl der Modelle

Die für das geplante Simulatoren-Benchmarking vorgeschlagenen Beispielmodelle erstrecken sich über unterschiedliche Komplexitätsgrade, angefangen von 1D-Prinzipmodellen über generische 2D- und 3D-Endlagerteilsystemmodelle bis hin zu realen Feldexperimenten und Feldbeobachtungen. Mit dieser Bandbreite soll einerseits die Möglichkeit zur erleichterten Ergründung von Unterschieden in den Berechnungsergebnissen der Kooperationspartner gegeben werden (→ bessere Lokalisierbarkeit bei kleinen geometrischen Modellen) sowie andererseits die Option des Vergleichs der Berechnungsergebnisse auch mit analytischen Lösungen abgedeckt werden. Im Vordergrund stehen bei diesem Benchmarking nicht spezielle Prozesse oder hochgradig spezialisierte Stoffmodelle, sondern die unterschiedlichen Simulatoren, mit denen die Partner die Berechnungen der Benchmarks und später auch die Berechnungen für reale Endlagerprojekte durchführen würden in der Überzeugung, rechnerisch zuverlässige und physikalisch zutreffende Simulationen vorzunehmen.

Die grundlegende Idee bei der Auswahl des Modellaufbaus ist daher stets die Simulierbarkeit des Modells von idealerweise allen Partnern, d.h. die Auswahl von TH²M-Eigenschaften des Wirtsgesteins (geologische Barriere) und des Verfüllmaterials (geotechnische Barriere), die möglichst von allen Partnern umgesetzt werden können. Unter Umständen ist es im Rahmen des Modellaufbaus in Einzelfällen erforderlich, auf im Grundsatz unterschiedliche Ansätze zurückzugreifen, diese aber dabei mittels ihrer Parameter so weit wie möglich und sinnvoll in phänomenologische und rechnerische Übereinstimmung zu bringen (beispielsweise bei simulatorbedingt unterschiedlichen Ansätzen für Relativpermeabilitäten wie in Abschnitt 6.3.5.1 für MUFTE-Thermo und FLAC).

Anregungen für die generischen Modelle sind Ausführungen zum schweizerischen Endlagerkonzept nach *Nagra (2008)* (→ Bild 8.1) und *Johnson et al. (2002)* sowie dem vorliegenden Bericht entnommen worden. Im Rahmen der Simulationen zum Wirtsgestein Salzstein ist für das Gebirge anstelle eines Schichtungsgefüges und einer Flüssigkeitssättigung ein (stationäres) Kriechmodell anzusetzen. Eine Einigung auf konkrete Parametersätze würde bei beiden Wirtsgesteinen dann in Absprache mit den Kooperationspartnern erfolgen. Bild 8.1 gibt einen Eindruck von der geometrischen Komplexität eines geplanten Endlagers. Das geplante Benchmarking soll sich auf unterschiedliche lokale Teilmodelle, so genannte Lokalmmodelle,

beziehen, mit denen das Verhalten signifikanter und charakteristischer Teilkomponenten eines Endlagersystems analysiert wird.

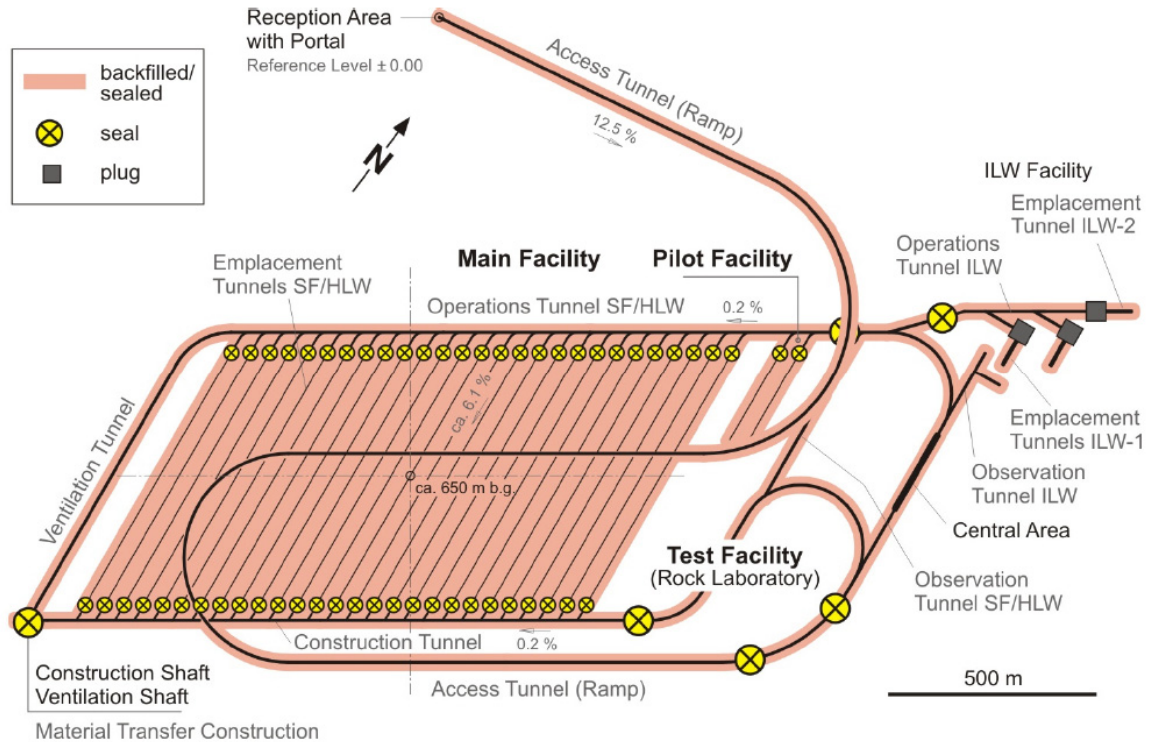


Bild 8.1: Design für ein schweizerisches Endlager für sowohl hochaktive Abfälle (HLW) und verbrauchte Brennelemente (SF) wie auch mittelaktive Abfälle (ILW), Nagra (2008), Zustand nach Verschluss

8.3.2 Eindimensionale Modelle

Bei den Simulationen im Rahmen dieses Forschungsvorhabens ist des öfteren auf eindimensionale Beispielmmodelle zurückgegriffen worden, da solche Modelle einfacher zu analysieren sind und insbesondere bei der Verifizierung von neu implementierten Codebausteinen Einflüsse von möglichen Programmierungsunzulänglichkeiten (unberücksichtigte Sonderfälle, unvollständige Verzweigungen, Tippfehler etc.) besser lokalisiert und behoben werden können. Bereits bei derart simplen Berechnungsmodellen können simulatorbedingte Schwierigkeiten auf eine vorab nicht vorhersehbare Weise auftreten, wie z.B. aus den Ausführungen in Abschnitt 6.3.5.4 ersehen werden kann. Aus einem analogen Grund ist es auch für sinnvoll erachtet worden, das Benchmarking mit eindimensionalen Modellen zu beginnen.

Mit der Einbeziehung von einer Berechnungsvariation unter Einphasenfluss wäre bei Bedarf seitens der Kooperationspartner auch ein Vergleich von Simulationsergebnissen mit einer analytischen Lösung für die Verteilungen der Porenwasserdrücke und der Verschiebungen durchführbar. Mit analogen Gleichungen zu denjenigen aus Abschnitt 5.4 ließen sich auf diese Weise das in Bild 8.2 dargestellte Prinzipmodell eines Dammbauwerkes berechnen und die Ergebnisse vergleichen. In diesem Beispiel wird ein sehr gering permeables Dammbauwerk aus Bentonit oder Salzgrus schematisch dargestellt, an dessen rechtem Rand sich eine trocken versetzte Strecke mit einer höheren Porosität und einer höheren Permeabilität befindet und an dessen linkem Rand aufgrund einer Flutung oder eines Absaufens Wasser unter dem der Sohlenteufe entsprechenden hydrostatischen Druck ansteht. Bedingt durch die geringe Permeabilität des Dammbauwerkes bildet sich ein linearer Porenwasserdruckverlauf nur allmählich aus. Die zeitlichen Verläufe der Druckentwicklungen und der auf diese Weise induzierten Deformationen können dann an verschiedenen Stellen aufgezeichnet und miteinander und mit der analytischen Lösung verglichen werden, vgl. die in Abschnitt 6.4.2.3 gezeigten Graphen.



Bild 8.2: Vorschlag für ein 1D-Beispielmodell: vollgesättigtes Dammbauwerk unter Einphasenflussbedingungen (analytisch lösbar)

Zum Vergleich der Simulatorfähigkeiten im Bereich des Zweiphasenflusses sowie der vollständigen TH²M-Prozesskopplung bietet sich das folgende Benchmark-Beispiel an, bei dem eine vereinfachte Einlagerungsstrecke, die zwei HLW-Behälter enthält und mit einem Abdichtungsbauwerk verschlossen ist, schematisch in einer Dimension dargestellt wird, Bild 8.3. Da die Abfallbehälter selbst bedingt durch die vereinfachte Modellierung nicht physikalisch abgebildet und vom Versatzmaterial abgegrenzt werden können, werden sie im Modell durch ein hydraulisch vermindert permeables und thermisch verstärkt leitfähiges Ersatz-Versatzmaterial mit einem äquivalenten Porenvolumen (= mit verminderter Porosität) in den entsprechenden Bereichen repräsentiert. Auch das Verschlussbauwerk erhält eine gegenüber dem normalen Versatzmaterial abseits der Behälterbereiche deutlich verringerte Permeabilität (Übergang von einem physikalisch möglichst realitätsnah aufgebauten Lokalmodell zu einem Funktionalmodellelemente enthaltenden, hier räumlich noch eng begrenzten Globalmodell).

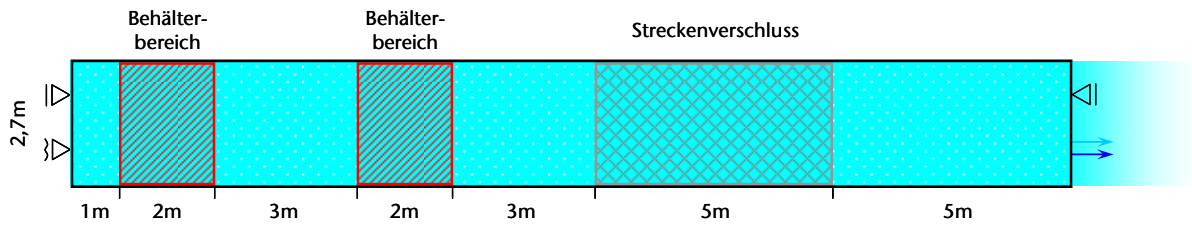


Bild 8.3: *Vorschlag für ein generisches 1D-Beispielmodell: verfüllte und verschlossene Strecke mit zwei Abschnitten innerhalb des Einlagerungsbereiches, in denen sich jeweils ein Abfallbehälter befindet*

Der das Streckenende repräsentierende linksseitige Modellrand wird gemäß einer idealen Gebirgsvorstellung mechanisch unverschieblich gelagert und als hydraulisch dicht angenommen. Eine geeignete thermische Randbedingung ist noch abzusprechen; eine erste Idee wäre eine in regelmäßigen zeitlichen Abständen erneuerte Fixierung der Temperatur auf einen Mittelwert, der aus der zuletzt fixierten Temperatur und der Temperatur in der Einlagerungsstrecke nahe ihrem linken Rand berechnet wird. Im rechtsseitigen Modellabschnitt schließt an das Verschlussbauwerk noch ein kurzer Bereich an, der den Beginn einer langen verfüllten Infrastrukturstrecke darstellen soll. Ziel ist es hierbei, den thermodynamischen Zustand auch unmittelbar hinter dem Verschlussbauwerk (aus Sicht der Einlagerungsstrecke) beobachten und vergleichen zu können. Als mechanische Randbedingung wird am rechten Rand dieses Infrastrukturstreckenbereiches erneut Unverschieblichkeit angesetzt; gegebenenfalls kann der Zahlenwert für den Verformungsmodul im Infrastrukturstreckenbereich abgesenkt werden, um die auf diese Weise erhaltene starre Blockade zu kompensieren. Hydraulisch und – in einem ersten Ansatz? – auch thermisch wird der rechtsseitige Rand als durchlässig bei Festsetzung der anfänglichen Porenfluiddrücke und Temperaturen modelliert, da die gegenüber dem Verschlussbauwerk erhöhte intrinsische Permeabilität des Versatzmaterials für eine relativ schnelle Ableitung des nur langsam aus dem Bauwerk hinzuströmenden aufgeheizten Porenwassers sorgen dürfte. Die Fokuse für Ergebnisvergleiche liegen bei diesem Modellbeispiel zum einen auf der inhomogenen Gas- und Wärmequellenverteilung in der Einlagerungsstrecke und dort insbesondere auf den beiden 3m langen Versatzbereichen hinter den Abfallbehältern verbunden mit der Fragestellung, inwieweit das Verschlussbauwerk und der rechte Behälter die TH^2 -Abströmungsprozesse blockieren, und zum anderen auf dem hinter dem Verschlussbauwerk fortgesetzten Abstrom von Wasser, Gas und Wärmeenergie mit der Frage nach der Verschlussqualität.

8.3.3 Zweidimensionale Modelle

Der nächste Schritt in der Steigerung der Komplexität des Berechnungsmodells ist die Ausweitung auf zwei Modelldimensionen. Hier besteht der Vorschlag des LfD&G in einem 2D-Modell für eine Strecke oder Kammer eines Einlagerungsbereiches bei Variation der Querschnittsgeometrie. Unterschiedliche Abfallarten besitzen unterschiedliche Eigenschaften, insbesondere hinsichtlich der Wärmeentwicklung. Während bei hochradioaktiven Abfällen (HLW) und verbrauchten Brennelementen (SF) aufgrund ihrer Wärmeentwicklung ein An-

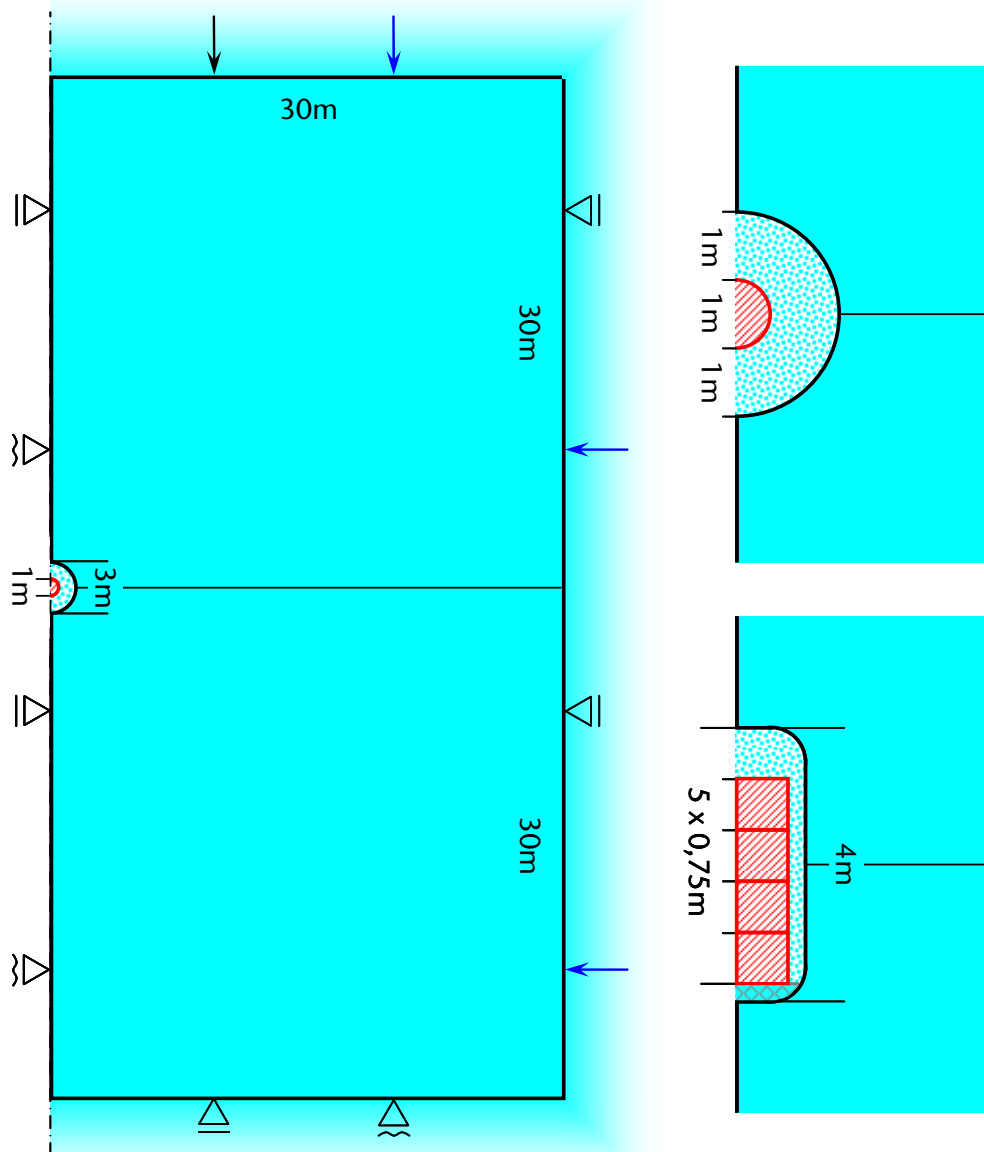


Bild 8.4: Vorschlag für ein generisches 2D-Beispielmodell: verfüllter Einlagerungsbereich mit zwei unterschiedlichen Querschnitten (rechts): kreisrunde Strecke für SF/HLW-Behälter (oben) und längliche Kammer für LILW-Behälter (unten)

stieg der Temperaturen in der Umgebung der Behälter auf mehr als 100°C zu berücksichtigen ist, bei dem Verdampfungsprozesse des Porenwassers einen zusätzlichen Porendruckanstieg induzieren, können schwach- und mittelradioaktive Abfälle (LLW/ILW oder zusammen LILW) kompakter gestapelt und gelagert werden. Als Folge bestehen bei Endlagerplanungen unterschiedliche Einlagerungsformen für SF/HLW- und LILW-Abfälle, welche in den Berechnungsvariationen im Rahmen des 2D-Modellbeispiels berücksichtigt werden könnten. Bild 8.4 zeigt die vorgeschlagene Modellgeometrie mit zwei variierten Streckenkonturen: Der im Bild oben rechts gezeigte Querschnitt entspricht dem einer SF/HLW-Einlagerungsstrecke, und der unten rechts abgebildete Querschnitt steht exemplarisch für eine LILW-Einlagerungskammer. Während im ersten Szenario erhöhte Wärmeproduktionsraten in die Modellierung aufzunehmen sind, ist bei der Modellierung des zweiten Szenarios eine geeignete Abrundung der Eckbereiche der Kammer empfehlenswert mit Blick auf dort in der Regel auftretenden Spannungskonzentrationen bei der mechanischen Simulation. Die hier gerade Form der Ulmenbereiches führt des Weiteren üblicherweise zur Ausbildung eines so genannten Druckschattens (siehe Bild 8.5 sowie Bild 7.17 in Abschnitt 7.6), also eines konturnahen Bereiches innerhalb des Gebirges, in dem die Tangentialspannungen gegenüber ihrem lokalen Spitzenwert, der sich etwas weiter von der Kontur entfernt im Gebirge befindet, abfallen. Entsprechend sind bei der Modellierung im Tongestein Spitzenwerte auch für die Porendrücke auf der Höhe der Spitzenwerte der Tangentialspannungen rund um den Hohlraum direkt nach seinem Ausbruch zu erwarten. Darüber hinaus ist bei diesem Beispiel von verstärkter Gasbildung infolge Metallkorrosion und mikrobieller Degradation auszugehen.

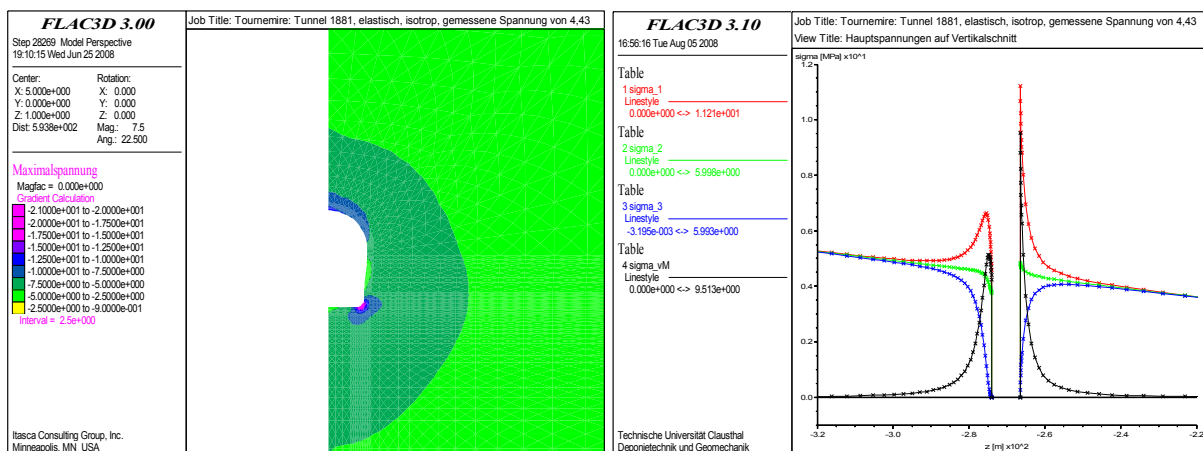


Bild 8.5: Visualisierung des Druckschattens anhand der Maximalspannungen σ_1 in der Umgebung eines nicht kreisförmigen Hohlrums, Lux et al. (2012) – links: Niveauliniendiagramm für σ_1 ; rechts: Hauptspannungen entlang des Vertikalschnittes, der rote Graph zeigt σ_1

Aus Symmetriegründen ist zwecks Rechenzeitverkürzung lediglich eine Hälfte des eigentlichen physikalischen Modells zu modellieren. Die Randbedingungen für die HM-Prozesse sind in Bild 8.4 mit angegeben. Die thermischen Randbedingungen sind analog zu den hydraulischen zu wählen, d.h. Isolation an der Symmetrieachse und Fixierung auf den Primärzustand an den Modellrändern.

8.3.4 Dreidimensionales Modell

Kann eine Simulation des zweidimensionalen Beispielmodells mit den unterschiedlichen Simulatoren zufriedenstellend erfolgen, besteht die nächste Stufe aus einem dreidimensionalen Berechnungsmodell wie beispielsweise dem in Bild 8.6 vorgeschlagenen Gebirgsausschnitt. In diesem Modell sind Ansätze aus den beiden vorangehenden Modellen kombiniert worden. Der Hauptgesichtspunkt für die Analyse bei dem Modell ist die Ausbreitung der radioaktiv belasteten Lösung über verschiedene Pfade (radiologische Aspekte wie Nuklidtransport oder Zerfallsketten werden hierbei nicht mitmodelliert). Eine Variation der intrinsischen Permeabilitäten des Versatzmaterials, des Abdichtungsbauwerks, des idealerweise nicht geklüfteten Wirtsgesteins sowie der ggf. mitmodellierten EDZ beeinflusst die Ausbreitungsrichtung der Lösung. Zu beobachten ist hier im Rahmen der Simulation neben der Entwicklung der thermodynamischen Zustände an Schlüsselstellen im Endlagersystem (im Versatz neben Behältern, beidseitig neben Kontaktflächen Versatz/Gebirge sowie Versatz/Verschluss) insbesondere auch die Fließrate der Flüssig- und der Gasphase an den jeweiligen Austrittsstellen (Abdichtungsbauwerk, EDZ, Modelloberseite). Das Modell kann auf Wunsch der Kooperationspartner auch noch um eine verfüllte und verschlossene Betriebsstrecke und einen verfüllten Schacht erweitert werden, so dass ein direkter Vergleich zwischen den Austrittsstellen Streckensystem (Schacht) und Gebirge (Modelloberseite) möglich wird. An der linken Rückseite bestehen darüber hinaus die beiden Möglichkeiten, einen ergänzenden 50m langen Gebirgsbereich hinzuzufügen und auf diese Weise das Ende der Einlagerungsstrecke zu simulieren, oder die Seite als Spiegelebene zu definieren und auf diese Weise eine durchgängige Einlagerungsstrecke darzustellen, wie sie z.B. im schweizerischen Endlagerkonzept nach Bild 8.1 vorgesehen ist.

Die thermischen, hydraulischen und mechanischen Fernfeld-Randbedingungen sind wie für das 2D-Beispielmodell zu wählen.

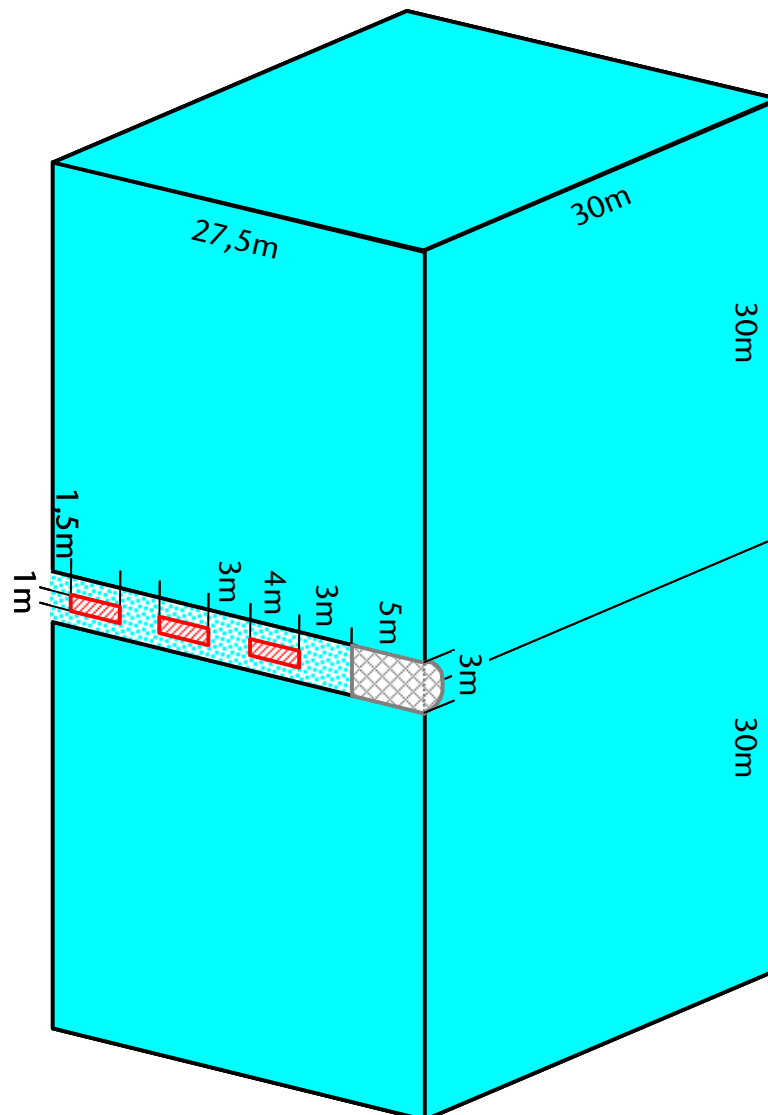


Bild 8.6: Vorschlag für ein generisches 3D-Beispielmodell: Einlagerungsstrecke als Kombination aus dem kreisrunden Querschnitt aus Bild 8.4 und einer Behälter-Verschluss-Aufteilung ähnlich wie in Bild 8.3

8.3.5 Feldexperimente

Als finaler Vergleich für die am Benchmarking beteiligten Simulatoren wird angedacht, für jedes Wirtsgestein eine reale Feldexperimentalsituation abzubilden. Im Rahmen des in den Abschnitten 6 und 7 mit Blick auf den FTK-Simulator identifizierten Erweiterungsbedarfs erscheint es dabei sinnvoll, neben noch nicht mit dem FTK-Simulator untersuchten in situ-Szenarien auch die in diesem Vorhaben bereits behandelten komplexeren Beispielmodelle nach einer Weiterentwicklung des FTK-Simulators erneut zu simulieren. Zudem ist es auch aus

Sicht der Zielstellung der Verifizierung *aller* am Benchmarking beteiligten Simulatoren sinnvoll, Simulationsergebnisse von aktuell durchgeführten/durchzuführenden Simulationen den Kooperationspartnern zur vergleichenden Simulation zur Verfügung zu stellen.

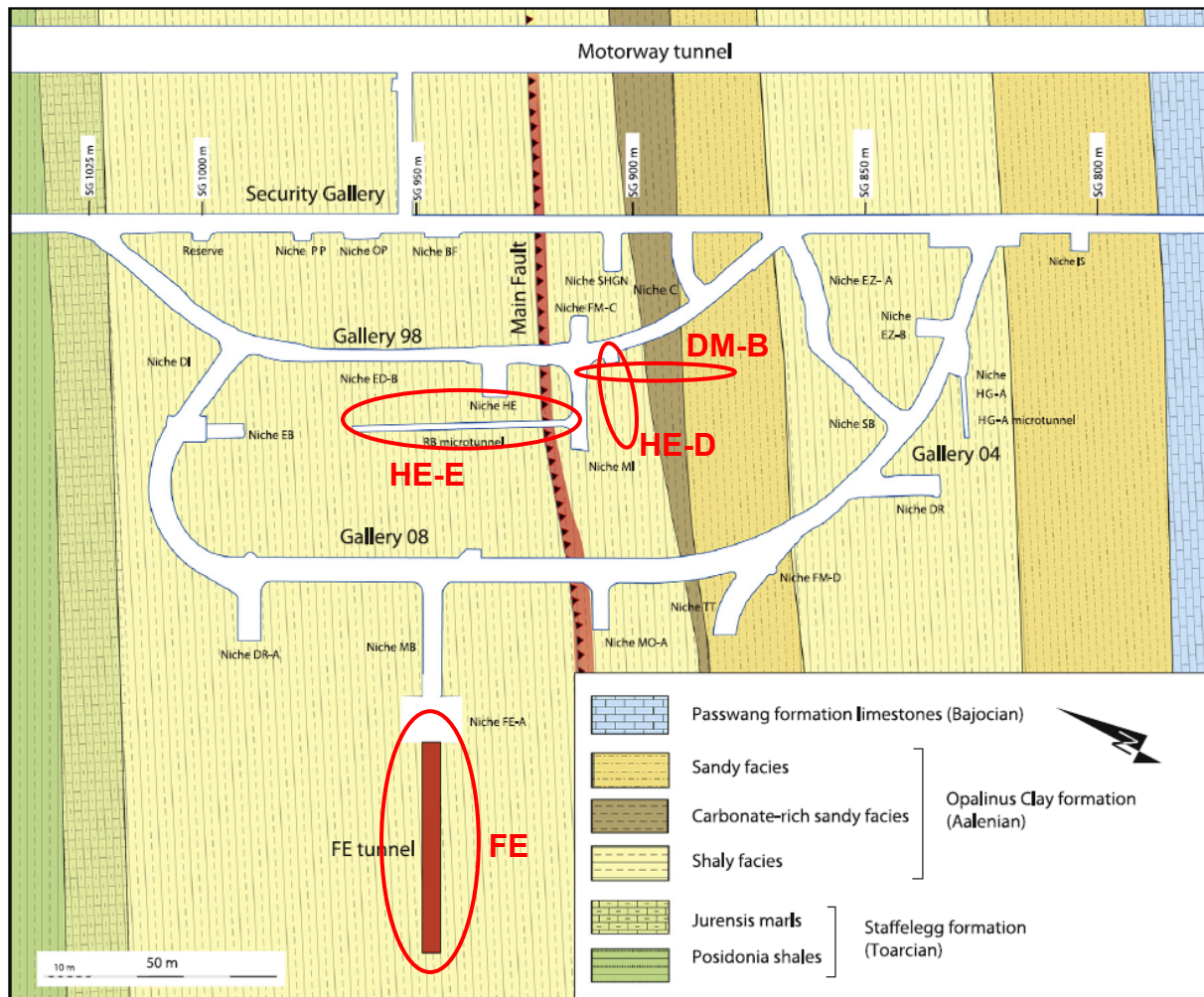


Bild 8.7: Lageplan für das Felslabor Mont Terri mit Hervorhebung der Positionen der Experimente DM-B, FE, HE-D und HE-E, modifiziert nach Lisjak et al. (2015)

Für das Wirtsgestein Tonstein bieten sich hierfür basierend auf den bestehenden langjährigen Kontakten des LfD&G verschiedene Experimente und Szenarien aus dem Forschungslabor Mont Terri zur Auswahl an:

- FE-Experiment (Full-scale Emplacement demonstration):
verfüllte Einlagerungsstrecke im Maßstab 1:1 mit drei Erhitzern und umfassender Instrumentierung zur Messung von Gebirgsdeformationen, Porenwasserdrücken, relativen Luftfechtigkeiten und Temperaturen, Bilder 8.8 bis 8.10, Lisjak et al. (2015)

- DM-B-Experiment (Deformation Mechanisms):
Bohrlochabteufung unter Messung von Deformationen und Porenwasserdrücken im Bohrlochnahfeld abseits von bestehenden Strecken (Benchmark aus Abschnitt 7), Bild 8.11, *Czaikowski et al. (2014)*
- HE-D/E-Experiment (Heater Experiment):
zwei kleinskalige Einlagerungsstrecken mit jeweils zwei Erhitzern und umfassender Instrumentierung zur Messung von Gebirgsdeformationen, Porenwasserdrücken und Temperaturen – HE-D: Bohrloch ohne Versatzmaterial, Untersuchung der thermisch induzierten Einflüsse im Gebirge; HE-E: Mikrotunnel ($\varnothing 1,30m$) mit zwei unterschiedlichen Versatzmaterialien (granuläres Bentonit sowie Sand-Bentonit-Gemisch), Bilder 8.12 bis 8.15, *Kull et al. (2007)* bzw. *Gaus et al. (2014)*
- Bohrloch-Strecken-Modell:
Abteufen eines Bohrlochs in einer bestehenden Strecke im Opalinuston in Anlehnung an die Abteufung von BDM-B1 (Modellbeispiel aus Abschnitt 6.4.3), Ansatz von Einphasenflussprozessen, Bild 8.16

Für das Wirtsgestein Steinsalz besteht als Beispiel die Versuchsstrecke B im ehemaligen Salzbergwerk Asse, die im Rahmen des Projektes „BAMBUS II“ untersucht und beschrieben worden ist, Bild 8.17, *Bechthold et al. (2004)*.

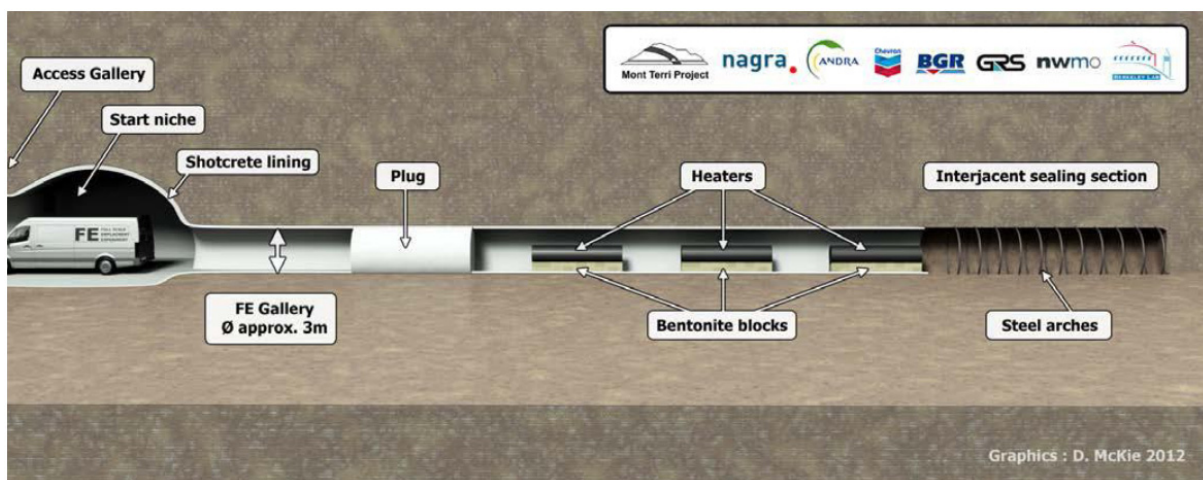


Bild 8.8: FE-Experiment im URL Mont Terri: Skizze, *García-Siñeriz Martínez et al. (2015)*

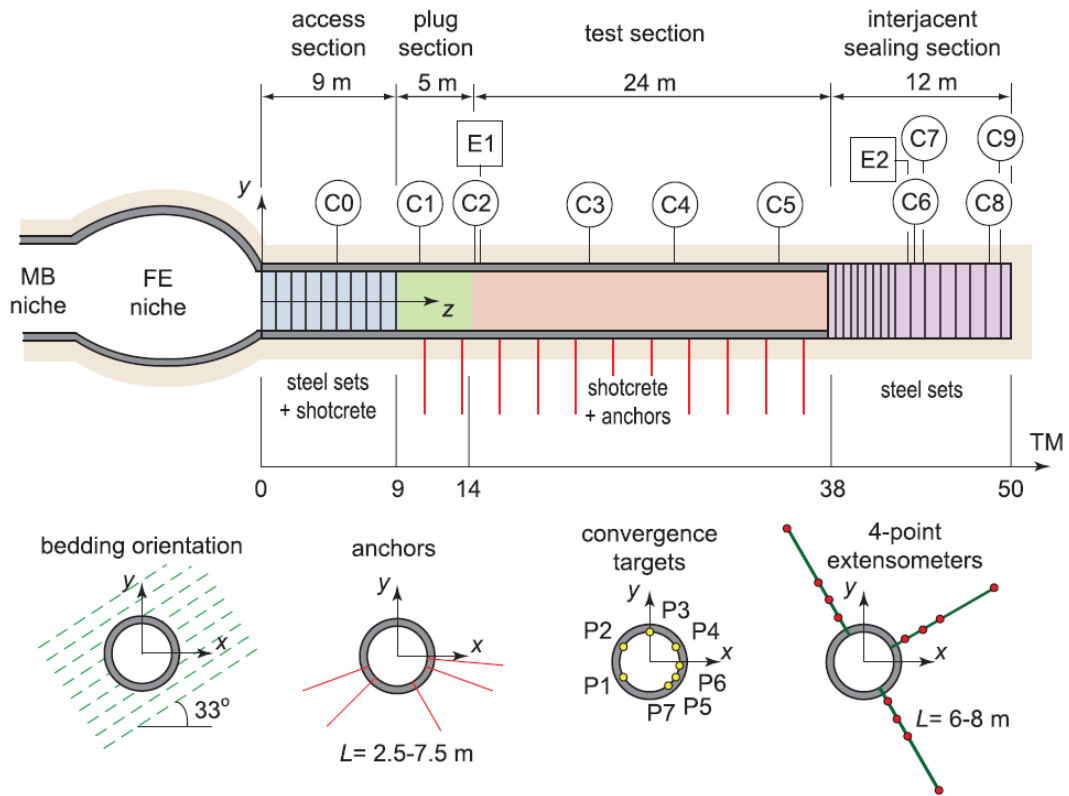


Bild 8.9: FE-Experiment im URL Mont Terri: Abmessungen zum FE-Tunnel, Lisjak et al. (2015) – C0-C9: Schnittpositionen für geodätische Tunnelkonvergenzmessungen (Tachymeterreflektoren); E1-E2: Schnittpositionen für radiale Gebirgsdeformationsmessungen (Extensometer)

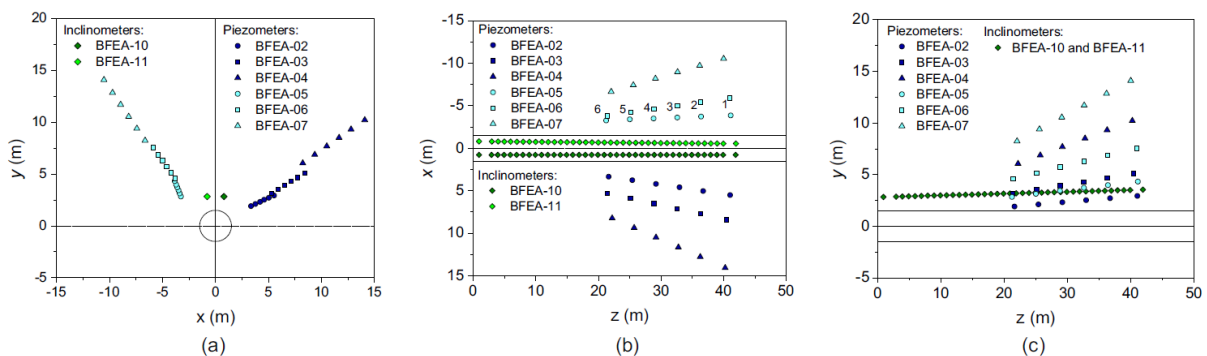


Bild 8.10: FE-Experiment im URL Mont Terri: Positionen der Sensoren in den vor Tunnel-auffahrung installierten Bohrlochinklinometer- und -piezometerreihen, Lisjak et al. (2015) – (a) in der Querschnittsebene, (b) in der Draufsicht und (c) in der vertikalen Längsebene

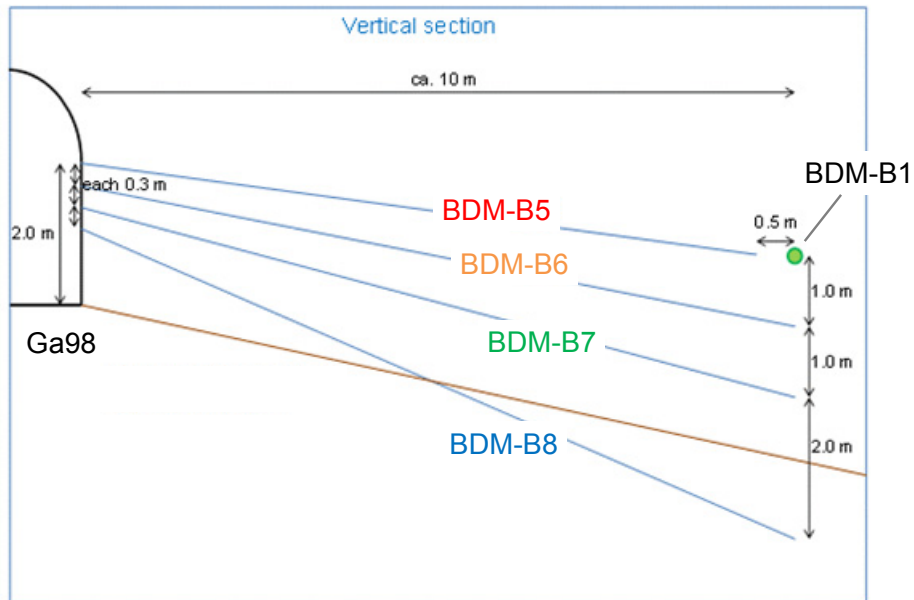


Bild 8.11: DM-B-Experiment im URL Mont Terri: Instrumentierung der Gebirgsbereiche um das Bohrloch BDM-B1 mit Porenwasserdrucksensoren in den Bohrlochtiefsten der Messbohrlöcher BDM-B5 bis BDM-B8, Czaikowski et al. (2014)

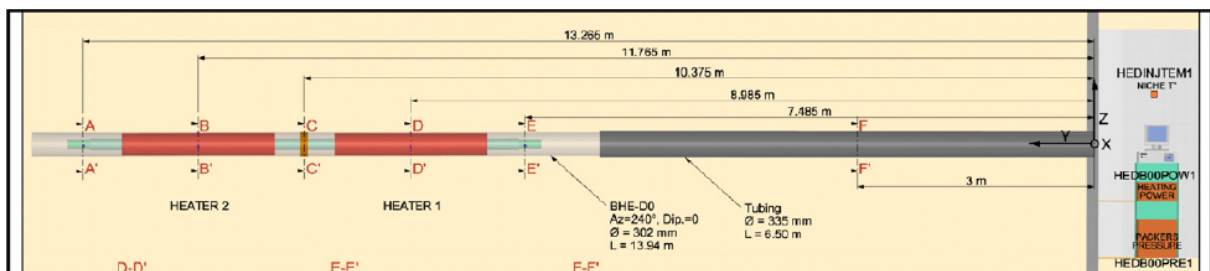


Bild 8.12: HE-D-Experiment im URL Mont Terri: Abmessungen zum Bohrloch BHE-D0, Kull et al. (2007)

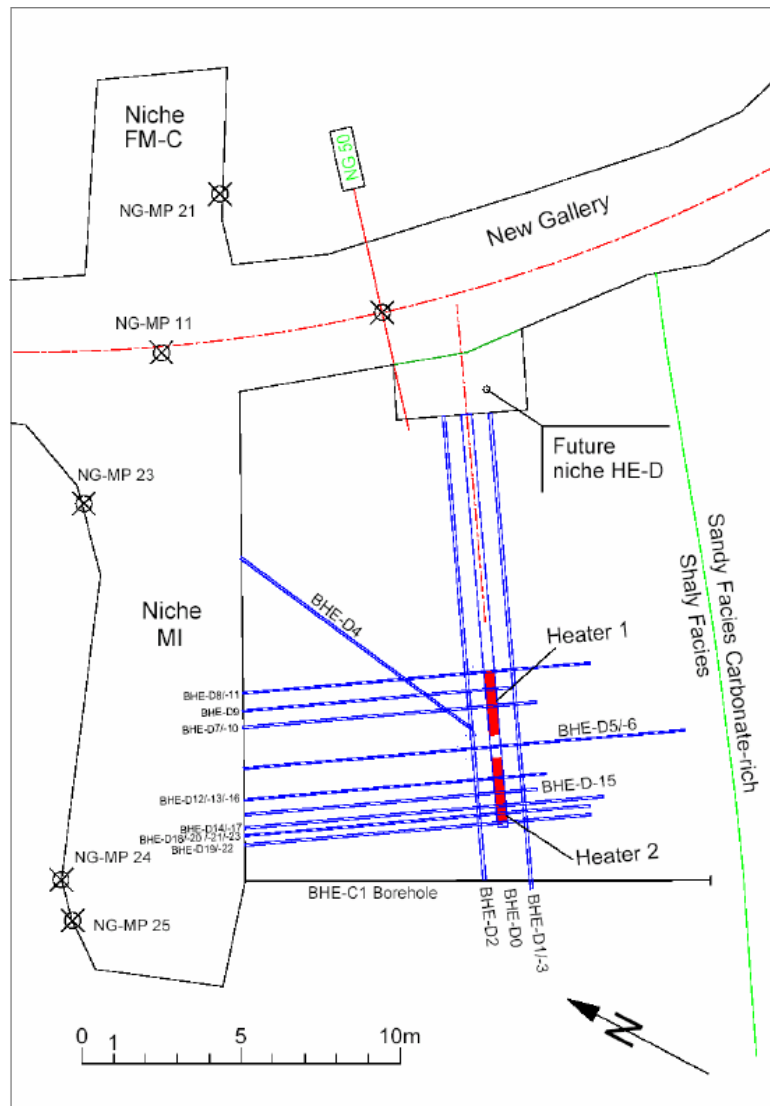


Bild 8.13: HE-D-Experiment im URL Mont Terri: Instrumentierung, Wileveau (2005)

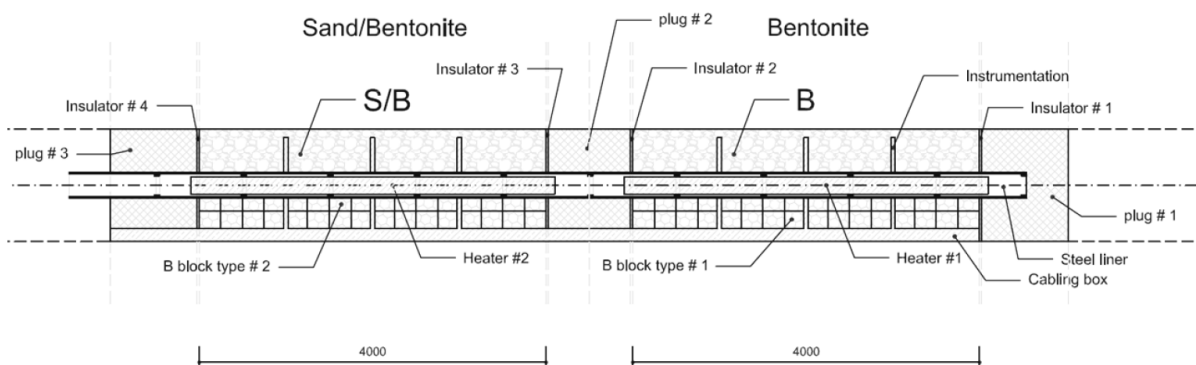


Bild 8.14: HE-E-Experiment im URL Mont Terri: Layout, Gaus et al. (2014)

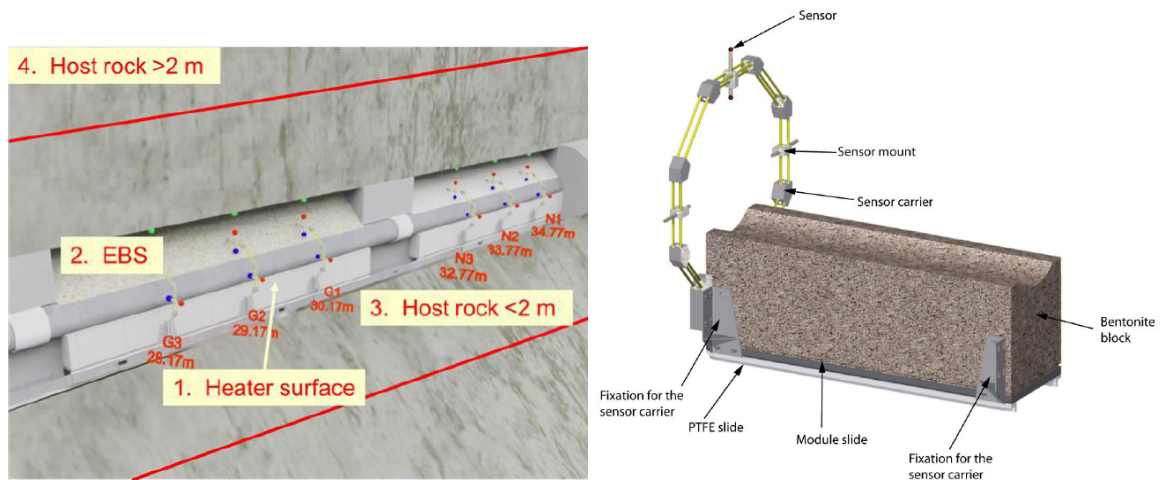


Bild 8.15: HE-E-Experiment im URL Mont Terri: Instrumentierung im Versatz, Gaus et al. (2014)

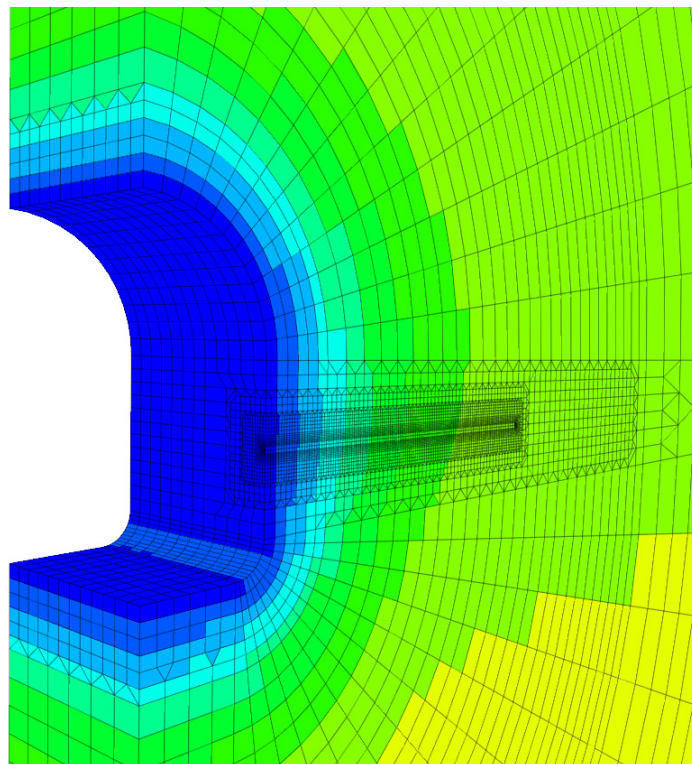


Bild 8.16: Teilbereich des Bohrloch-Strecken-Modells aus Abschnitt 6.4.3.8 zur dreidimensionalen Simulation des Bohrlochabteufens im hydraulisch-mechanischen Nahfeld eines Streckenabschnitts mit bereits ausgebrochenem Streckenabschnitt und Diskretisierung des horizontal verlaufenden Bohrlochs im Stoßbereich der Strecke

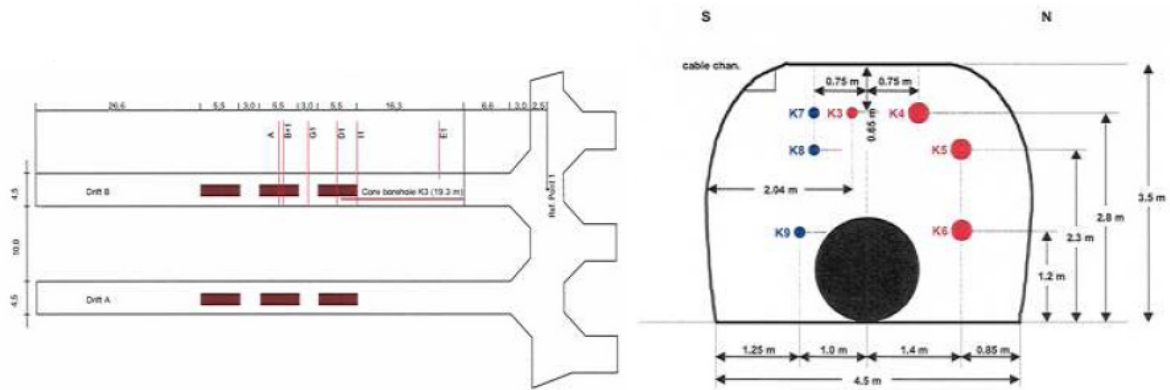


Bild 8.17: Versuchsstrecke B auf der 800m-Sohle des ehemaligen Salzbergwerks Asse, Bechthold et al. (2004)



9 Zusammenfassung der Ergebnisse des Projekts mit einigen Anmerkungen für weiterführende Arbeiten

9.1 Überblick

Im Rahmen dieses Forschungsvorhabens sind vornehmlich insgesamt vier Forschungsschwerpunkte zu zwei Hauptzielen bearbeitet worden:

- Entwicklung eines Simulators zur mechanisch-hydraulisch-thermisch gekoppelten Analyse des Tragverhaltens von Hohlräumen im Tonsteingebirge („FTK-Simulator“) mit den beiden Schwerpunkten Entwicklung/Verifizierung und Validierung/Benchmark,
- Weiterführung von Untersuchungen zum Trag- und Deformationsverhalten von Ton(ge)stein mit den beiden Schwerpunkten in situ (Untersuchungen in Bohrlöchern im Tonsteingebirge zur Beobachtung des zeitabhängigen Tragverhaltens) und gesteinsmechanisches Labor (Untersuchungen an Tonsteinprüfkörpern zur Quantifizierung des Trag- und Deformationsverhaltens mit besonderem Augenmerk auf hydraulisch bedingte Einflüsse).

Der neu entwickelte FLAC^{3D}-TOUGH2-Kopplungs-Simulator ist für den Einsatz im Bereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Gebirgsformationen konzipiert worden und verbindet zwei in diesem Anwendungsbereich langjährig bewährte Simulationsprogramme auf sequenzielle Weise miteinander. Mit diesem auf dem geomechanischen Programm FLAC^{3D} und dem thermohydraulischen Programm TOUGH2 fußenden FTK-Simulator ist es grundsätzlich möglich, für ein modelliertes Endlager(teil)system sowohl das mechanische Trag- und Deformationsverhalten unter Berücksichtigung von sich ändernden Porenfluiddrücken und Sättigungsgraden wie auch das durch Kompaktionen und Expansionen der Gesteinsmatrix beeinflusste hydraulische Strömungsverhalten und auch das daran gekoppelte thermische Strömungsverhalten (Wärmeausbreitung) numerisch zu analysieren. Im Zusammenhang mit der Entwicklung des FTK-Simulators sind zahlreiche Testberechnungsläufe zur Verifizierung der programmiertechnischen und der physikalischen Korrektheit durchgeführt worden, und auch erste Versuche zu seiner Validierung sind unternommen worden. Alle durchgeführten Verifizierungen haben gute bis sehr gute Ergebnisse geliefert, wohingegen die Validierungsuntersuchungen insbesondere von Berechnungsergebnissen unter Ansatz der eher komplexen hydraulischen Zweiphasenflussprozesse noch Verbesserungspotenzial aufzeigen.



Der wissenschaftliche Schwerpunkt bei der Validierung des FTK-Simulators hat im Bereich der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulation unter der Annahme der Ausbildung eines Einphasenflusses im Gebirge gelegen. Hierzu sind ausführliche numerische Simulationsarbeiten unter Verwendung des FTK-Simulators durchgeführt worden, deren Resultate in einen Ergebnisvergleich mit unter Verwendung des etablierten kommerziellen Simulators FLAC^{3D} generierten Ergebnissen eingegangen sind. Darüber hinaus sind im Rahmen der numerischen Simulationsarbeiten zum DM-B-Experiment auch erste Berechnungen unter der Annahme der Ausbildung eines Zweiphasenflusses im Gebirge unter Verwendung des FTK-Simulators durchgeführt worden. Die zum DM-B-Experiment unter Verwendung des FTK-Simulators generierten Ergebnisse sind mit in situ-Messergebnissen und mit von der GRS Braunschweig mit dem Simulator CODE_BRIGTH berechneten Ergebnissen gegenübergestellt worden. Im Rahmen der Ergebnisgegenüberstellung wurden sowohl zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren berechneten Ergebnissen sowie auch zwischen den in situ-Messergebnissen und den numerischen Ergebnissen zum Teil signifikante Unterschiede identifiziert, sodass insbesondere für den Bereich der Simulation des Zweiphasenflusses ein erheblicher weiterer Forschungsbedarf identifiziert werden konnte.

Neben den numerischen Simulationsarbeiten zum hydraulisch-mechanisch gekoppelten Gebirgsverhalten unter der Annahme der Ausbildung eines Ein- oder Zweiphasenflusses sind im Rahmen des Vorhabens in situ-Untersuchungen zum zeitabhängigen Bohrlochtrag- und Deformationsverhalten in den europäischen Untertagelaboren URL Mont Terri (Schweiz) und URL Tournemire (Frankreich) durchgeführt worden.

Im Rahmen der im URL Mont Terri durchgeführten Forschungsarbeiten konnte durch die Observation von vier neuen Bohrlöchern an einer bereits im Rahmen von *Lux & Seeska (2010)* ausführlich untersuchten Lokation innerhalb des URL Mont Terri die bestehende Datenbasis zum Langzeit(trag)verhalten von kleinmaßstäblichen Hohlräumen im Opalinuston entscheidend erweitert werden, wobei als besonderer wissenschaftlicher Erfolg hervorzuheben ist, dass für die untersuchten Observationsbohrlöcher ein in dieser Ausprägung bisher nicht bekannter, deutlicher systematischer Zusammenhang bezüglich des durch hydraulisch-mechanisch gekoppelte Prozesse beeinflussten Bohrlochtragverhaltens identifiziert werden konnte.

Im Rahmen der im URL Tournemire durchgeführten Forschungsarbeiten sind die bereits im Jahr 2007 begonnenen und in *Lux et al. (2012)* reportierten Langzeitobservationsarbeiten an zwei aus drei bzw. fünf Observationsbohrlöchern bestehenden, an zwei unterschiedlichen



Lokationen innerhalb des URL Tournemire gelegenen Bohrlochgruppen fortgesetzt worden. Im Rahmen der Fortsetzung der Forschungsarbeiten konnten bereits in *Lux et al. (2012)* identifizierte Trends zum Langzeittrag- und Deformationsverhalten überwiegend bestätigt werden, wobei jedoch insbesondere in Bezug auf das zeitabhängige hydraulische Verhalten für eines der Observationsbohrlöcher eine überraschende Wendung mit einer aus endlagertechnischer Sicht betrachtet überaus signifikanten plötzlichen erneuten Zunahme der hydraulischen Aktivität festgestellt werden konnte. Durch die Fortsetzung der im Jahr 2007 begonnenen Observationsarbeiten bis in das Jahr 2014 hinein liegen nun erstmals Informationen zum zeitabhängigen Bohrlochtrag- und Deformationsverhalten über einen Zeitraum von nahezu sieben Jahren vor, wobei das Alter der betrachteten Observationsbohrlöcher zum Zeitpunkt der Beendigung der Forschungsarbeiten innerhalb des *URL Tournemire* zwischen ca. viereinhalb und zehn Jahren gelegen hat.

Im Zuge der laborativen Untersuchungen sind sowohl Versuche zum ein- und triaxialen Kurzzeitfestigkeitsverhalten sowie auch zum ein- und triaxialen Langzeitdeformationsverhalten an Opalinustonproben aus dem URL Mont Terri durchgeführt worden. Ein besonderes Augenmerk hat im Zuge der Durchführung der laborativen Untersuchungen zum Langzeitdeformationsverhalten auf der Sensitivität der Prüfkörper gegenüber Feuchtigkeitsvariationen in der Umgebungsluft gelegen. Sowohl bei der Auswertung der Ergebnisse der einaxialen Dauerstandversuche wie auch bei der Auswertung eines triaxialen Dauerstandversuchs konnten wertvolle Erkenntnisse zum zeitabhängigen Deformationsverhalten von Opalinuston aus der tonigen Fazies gewonnen werden. Im Rahmen der laborativen Untersuchungen zur Kurzzeitfestigkeit konnten darüber hinaus Erkenntnisse bezüglich der Festigkeitseigenschaften von Gesteinsproben aus der bisher nur sehr wenig erforschten sandigen und der ebenfalls nur sehr wenig erforschten karbonatreichen sandigen Fazies generiert werden.

Nachfolgend werden die wichtigsten Forschungsergebnisse zusammenfassend und thematisch wie folgt untergliedert aufgeführt:

- (1) Bohrlochobservationsarbeiten im URL Mont Terri,
- (2) Bohrlochobservationsarbeiten im URL Tournemire,
- (3) Laborative Untersuchungen an Gesteinsmaterial aus dem URL Mont Terri,
- (4) Entwicklung, Verifizierung und Validierung des FTK-Simulators für thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Analysen.



9.2 Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse zu den Bohrlochobservationsarbeiten im URL Mont Terri

Im Rahmen dieses Vorhabens ist der Versuch unternommen worden, die in *Lux & Seeska (2010)* sowie in *Lux et al. (2012)* dokumentierten Erkenntnisse aus Bohrlochobservationsarbeiten, in deren Rahmen das Langzeittrag- und Deformationsverhalten von insgesamt sieben innerhalb des URL Mont Terri abgeteuften Bohrlöchern untersucht worden ist, durch die Observation von vier weiteren Bohrlöchern zu erweitern und abzusichern. Da drei der innerhalb der vorangegangenen Vorhaben untersuchten Observationsbohrlöcher sich innerhalb der Nische MI des URL Mont Terri befinden, ist es im Rahmen des aktuellen Vorhabens als aus wissenschaftlicher Sicht besonders sinnvoll erachtet worden, als nächsten Schritt zunächst weitere Observationsbohrlöcher in einem Gebirgsbereich, in dem bereits erste Erkenntnisse zum Bohrlochtrag- und Deformationsverhalten vorliegen, abzuteufen. Durch die Untersuchungen von nun insgesamt sieben Observationsbohrlöchern innerhalb der Nische MI in den vergangenen fünf Jahren ist es zum jetzigen Zeitpunkt erstmals möglich, reproduzierbare Muster bezüglich des Langzeittragverhaltens innerhalb von identisch orientierten Observationsbohrlöchern zu identifizieren.

Zunächst werden die wichtigsten Observationsergebnisse zum hydraulischen Verhalten des Tonsteingebirges im Umfeld der vier im Rahmen dieses Vorhabens innerhalb der Nische MI untersuchten Observationsbohrlöcher stichpunktartig zusammengefasst. Sie lauten wie folgt:

- (1) In drei der vier im Rahmen dieses Vorhabens observierten Bohrlöcher ist es zu signifikanten Feuchtigkeitszutritten gekommen.
- (2) Alle drei im Rahmen dieses Vorhabens observierten Bohrlöcher, in denen ein Feuchtigkeitszutritt festgestellt worden ist, sind in den südlichen Stoß der Nische MI abgeteuft worden.
- (3) In dem in die Ortsbrust der Nische MI abgeteuften Bohrloch haben innerhalb des gesamten Observationszeitraums als trocken zu bezeichnende Bedingungen vorgeherrscht.
- (4) Zwei der drei von einem Feuchtigkeitszutritt betroffenen Observationsbohrlöcher verlaufen mit ihrer Längsachse unter einer Neigung von $\delta \approx 40^\circ$ nach oben in den südlichen Stoß der Nische MI, während das dritte Bohrloch mit einer näherungsweise horizontalen Neigung seiner Längsachse in den südlichen Stoß der Nische MI hinein abgeteuft worden ist.



Zum Tragverhalten von horizontal in den südlichen Stoß der Niche MI und somit orthogonal zum Streichen der einfallenden Schichtflächen abgeteuften Bohrlöchern haben im Vorfeld dieses Vorhabens keine Erfahrungen vorgelegen, sodass keine Möglichkeit eines Vergleiches der Observationsergebnisse für das horizontal verlaufende Bohrloch BDM-B1 mit den Observationsergebnissen eines im Rahmen früherer in situ-Untersuchungen observierten Bohrlochs bestanden hat. Weiterhin ist auch bezüglich der Länge des untersuchten Bohrlochs mit den Observationsarbeiten innerhalb des Bohrlochs BDM-B1 mit seiner Endteufe von $t_{BL} \approx 30,5$ m wissenschaftlich-technisches Neuland betreten worden. Somit ist das Bohrloch BDM-B1 nicht nur das erste orthogonal zum Streichen der Schichtflächen horizontal in den südlichen Stoß abgeteuft Bohrloch, das vom LfD&G observiert worden ist, sondern es ist auch das erste der Observationsbohrlöcher, das große Teile der sandigen Fazies des Opalinustons durchteuft, wodurch innerhalb des Bohrlochs BDM-B1 erstmals eine Observation des geomechanisch-geohydraulisch gekoppelten Trag- und Deformationsverhaltens der Bohrlochwand in einem längeren innerhalb der sandigen Fazies gelegenen Bohrlochabschnitt möglich gewesen ist.

Die wichtigsten Observationsergebnisse aus dem Bohrloch BDM-B1 werden daher zunächst nachfolgend isoliert stichpunktartig dargestellt, bevor im Anschluss eine kombinierte Betrachtung der Observationsergebnisse aus den zwei im Rahmen dieses Vorhabens und den zwei im Rahmen von *Lux & Seeska (2010)* untersuchten, mit einer Neigung ihrer Längsachse von $\delta \approx 40^\circ$ nach oben in den südlichen Stoß der Niche MI abgeteuften Observationsbohrlöchern erfolgt. Im Anschluss daran erfolgt dann eine kombinierte Zusammenfassung der Observationsergebnisse für das im Rahmen dieses Vorhabens observierte, horizontal in die Ortsbrust der Niche MI abgeteuft Bohrloch sowie für das im Rahmen von *Lux & Seeska (2010)* untersuchte und ebenfalls horizontal in die Ortsbrust der Niche MI abgeteuft Observationsbohrloch.

Die wichtigsten Ergebnisse aus der Observation des horizontal in den Stoß der Niche MI abgeteuften Bohrlochs BDM-B1 können wie folgt zusammengefasst werden:

- (1) Als signifikantestes Observationsergebnis bezüglich des Bohrlochs BDM-B1 ist die große Ansammlung von dem Bohrloch zugetretenem Sickerwasser im hinteren, im Bereich der sandigen Fazies gelegenen Bohrlochbereich zu nennen.



- (2) Auch im vorderen, innerhalb der tonigen Fazies gelegenen Bohrlochbereich ist eine zeitabhängige Erhöhung des Feuchtegehaltes des Gesteins in der Bohrlochwand observiert worden.
- (3) In der frühen Phase des Observationszeitraums konnte die Ausbildung eines *wet spots* im Bereich der Bohrlochsohle in einem innerhalb der tonigen Fazies gelegenen Bohrlochbereich dokumentiert werden.
- (4) Die Bedingungen im vorderen, innerhalb der tonigen Fazies gelegenen Bohrlochabschnitt sowie darüber hinaus zumindest über große Teile des Observationszeitraums hinweg auch im darauf folgenden, innerhalb der karbonatreichen Fazies gelegenen Bohrlochabschnitt sind deutlich trockener gewesen als im innerhalb der sandigen Fazies verlaufenden Bohrlochabschnitt.
- (5) Bezüglich des Tragverhaltens des Bohrlochs BDM-B1 ist festzustellen, dass trotz des signifikanten Wasserzutritts eine hinreichende Standfestigkeit der Bohrlochwand im Sinne der Befahrbarkeit mit der Axial-Bohrlochkamera in allen Teufenbereichen über den gesamten Observationszeitraum hinweg gegeben gewesen ist.
- (6) Abgesehen von partiellem Bohrlochwandversagen in einigen lokal begrenzten Bohrlochbereichen verhält sich die Bohrlochwand auch in einem von einem starken Sickerwasserzutritt betroffenen, innerhalb der sandigen Fazies gelegenen Bohrlochabschnitt standfest.
- (7) Lediglich in den Faziesübergangsbereichen zwischen der tonigen und der karbonatreichen Fazies kommt es im Verlauf des Observationszeitraums zu stärkeren bruchhaften Veränderungen der Bohrlochwandbeschaffenheit und somit auch zu Veränderungen der Bohrlochkontur.

Anders als für den Fall des Observationsbohrlochs BDM-B1 hat für die Observationsbohrlöcher BDM-B2 und BDM-B3 die Möglichkeit eines Vergleichs der Observationsergebnisse mit den Befunden zu im Rahmen vorangehender in situ-Arbeiten untersuchten Observationsbohrlöchern bestanden, die sich ebenfalls innerhalb der Niche MI befinden und die mit der gleichen Orientierung ihrer Längsachse in den südlichen Stoß abgeteuft worden sind. Die wichtigsten Befunde zum zeitabhängigen Verhalten der innerhalb des aktuellen Vorhabens untersuchten Bohrlöcher BDM-B2 und BDM-B3 und der beiden zuvor im Rahmen von *Lux & Seeska (2010)* untersuchten Bohrlöcher BBB1 und BBB3 lauten folgendermaßen:



- (1) Zwischen allen vier mit einer Neigung ihrer Längsachse von $\delta \approx 40^\circ$ nach oben in den südlichen Stoß der Niche MI abgeteufte Observationsbohrlöchern konnten große systematische Übereinstimmungen bezüglich des geomechanisch-geohydraulisch gekoppelten zeitabhängigen Tragverhaltens im Bereich des Faziesübergangs zwischen toniger und karbonatreich-sandiger Fazies festgestellt werden.
- (2) Während sich die Bohrlochwand im innerhalb der karbonatreichen sandigen Fazies gelegenen Bohrlochbereich in allen vier Bohrlöchern als standfest erweist, kommt es im innerhalb der tonigen Fazies gelegenen Bohrlochbereich in allen vier Bohrlöchern zu großen Bohrlochkonturaufweitungen, die durch ein Versagen des Gesteins in den Bohrlochstößen hervorgerufen werden.
- (3) Die Konturveränderungen durch Gesteinsabplatzungen in den Stoßbereichen weisen in allen vier Observationsbohrlöchern in etwa eine vergleichbare Intensität auf.
- (4) Die Schädigungen der Bohrlochwand sind in allen vier observierten Bohrlöchern innerhalb des Gesteins der tonigen Fazies unmittelbar am Faziesübergang am stärksten ausgeprägt.
- (5) Die Schädigungen der Bohrlochwand in den Stoßbereichen treten in allen vier Bohrlöchern zunächst direkt im Bereich des Faziesübergangs auf, bevor sie sich ausgehend vom Faziesübergang zeitabhängig tiefer in die tonige Fazies hinein fortpflanzen.
- (6) In allen vier Bohrlöchern sind primär jeweils Aufweichungserscheinungen der Bohrlochwand innerhalb des in der tonigen Fazies gelegenen, dem Faziesübergang unmittelbar vorgelagerten Bohrlochbereichs für das zu beobachtende Bohrlochwandversagen verantwortlich, die durch aus den tiefer im Bohrloch und somit oberhalb gelegenen Bohrlochbereichen heruntersickerndes Gebirgswasser verursacht worden sind.
- (7) Das oberhalb des in der tonigen Fazies verlaufenden Bohrlochabschnitts zutretende Sickerwasser verursacht in allen vier Observationsbohrlöchern in dem innerhalb der tonigen Fazies gelegenen Teufenbereich zuerst eine Erhöhung des Feuchtegehaltes des Gesteins und im Anschluss daran eine Aufweichung des Gesteins in der Bohrlochwand (*softening*) möglicherweise einhergehend mit weiteren hydraulisch-mechanisch gekoppelten Effekten (Quellen – *swelling*), woraus schlussendlich das Versagen der Bohrlochwände in den durch den abteufungsbedingt induzierten Sekundärspannungszustand am stärksten belasteten Bohrlochstößen herbeigeführt wird.



- (8) Trotz der identifizierten Gemeinsamkeiten bezüglich des hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhaltens ergeben sich zwischen den vier Bohrlöchern auch Unterschiede bezüglich des hydraulischen Verhaltens und zwar insbesondere bezüglich der Intensitäten der Feuchtigkeitszutritte und bezüglich der zu Beginn der Observationszeiträume observierbaren Wasserzutrittsprozesse.
- (9) Lediglich für das Bohrloch BBB1 kann ein diskreter Sickerwasserzutrittsbereich identifiziert werden, während für die weiteren drei Bohrlöcher anhand der Betrachtung der Aufnahmen der Axial-Bohrlochkamera keine klar abgrenzbaren Teufen- oder Konturbereiche ausfindig gemacht werden können, in denen sich ein verstärkter Zutritt von Gebirgswasser in die Bohrlöcher hinein ereignet hat.
- (10) In den beiden Observationsbohrlöchern BBB3 & BDM-B2, die aufgrund ihrer größeren Endteufen bis in die sandige Fazies hineinreichen, ergibt sich eine schnellere Aufsättigung des Gesteins in der Bohrlochwand – einhergehend mit dem schnelleren Eintreten von aufweichungsbedingten Bohrlochwandschädigungen – als in den beiden Observationsbohrlöchern BBB1 & BDM-B3, die aufgrund ihrer geringeren Endteufen die sandige Fazies nicht erreichen.
- (11) Zur Differenzierung bezüglich des hydraulischen Verhaltens zwischen den Observationsbohrlöchern BDM-B2 und BBB3 ist anzumerken, dass das Bohrloch BDM-B2 unmittelbar nach dem Abteufen noch eine trockene Bohrlochwand aufgewiesen hat, während für das Bohrloch BBB3 bereits während des Bohrvorgangs das Vorhandensein von freiem Wasser festgestellt werden konnte.

In den beiden parallel zueinander in die Ortsbrust der Niche MI abgeteufte und im Streichen der Schichtung verlaufenden horizontalen Observationsbohrlöchern BDM-B4 (Observation im Rahmen dieses Vorhabens) und BBB2 (Observation im Rahmen von *Lux & Seeska (2010)*), die beide über ihre gesamte Länge hinweg ausschließlich innerhalb der tonigen Fazies verlaufen, ist hingegen kein signifikanter Feuchtigkeitszutritt feststellbar gewesen. Die wichtigsten Observationsergebnisse zu den beiden horizontal im Streichen der Schichtung verlaufenden Bohrlöchern sind wie folgt zu benennen:

- (1) In großen Teufenbereichen beider Bohrlöcher kommt es zu einem Versagen des Gebirges in den Schichtflächen.



- (2) Wie es für ein Versagen des Gebirges in den Schichtflächen typisch ist, ergibt sich das Bohrlochwandversagen innerhalb von beiden Bohrlöchern in Konturbereichen, in denen die einfallenden Schichtflächen das Bohrloch tangieren oder in tangentialer Richtung an der Bohrlochkontur vorbei verlaufen.
- (3) Während im Bohrloch BBB2 ein Schichtflächenversagen innerhalb des Observationszeitraums überwiegend im rechten unteren Bereich der Bohrlochkontur festgestellt werden konnte, ist es innerhalb des Bohrlochs BDM-B4 überwiegend zu einem Schichtflächenversagen im linken oberen Bereich der Bohrlochkontur gekommen.
- (4) Innerhalb des Bohrlochs BBB2 breitet sich das Schichtflächenversagen im rechten unteren Bereich der Bohrlochkontur zeitabhängig aus tieferen Bohrlochbereichen kontinuierlich mit Ausbildung einer Bruchfront in Richtung des Bohrlochmunds aus. Das innerhalb des Bohrlochs BDM-B4 zu identifizierende Schichtflächenversagen tritt im Vergleich dazu eher etwas unsystematisch in mehreren Teufenbereichen nahezu gleichzeitig auf.
- (5) Eine Erklärung bezüglich der Unterschiede zwischen den zu beobachtenden, schichtflächendominierten Bruchbildern sowie eine Erklärung für die Tatsache, dass das Schichtflächenversagen innerhalb der beiden Observationsbohrlöcher in vielen Teufenbereichen nur einseitig entlang der Bohrlochkontur auftritt, können auf Basis der bisher vorliegenden Datensätze nicht erarbeitet werden.

Zusammenfassend können als wichtigste Erkenntnisse aus den durchgeführten Bohrlochobservationsarbeiten die folgenden Aspekte genannt werden:

- (1) Die im Rahmen des aktuellen Vorhabens generierten Observationsergebnisse aus den Bohrlöchern BDM-B1 bis BDM-B4 verdeutlichen insbesondere in Kombination mit den im Rahmen von *Lux & Seeska (2010)* aus den Observationsbohrlöchern BBB1 bis BBB3 gewonnenen Observationsergebnissen, welche zentrale Bedeutung der Kenntnis und dem Verständnis des hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhaltens des Opalinustons bei der Vorhersage des Tragverhaltens und der Bewertung der Standfestigkeit von Hohlräumen im Opalinuston zukommen (→ bautechnische Machbarkeit).
- (2) Zu einer Vertiefung des Verständnisses für die im Opalinuston ablaufenden hydraulisch-mechanisch gekoppelten Prozesse ist es erforderlich, die im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten Observationsarbeiten in Zukunft durch vertiefende laborative Untersu-



chungen zum hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten des Opalinustons zu ergänzen.

- (3) Gegebenenfalls ist auch eine Observation weiterer Bohrlöcher innerhalb des URL Mont Terri vorzunehmen, um die insbesondere für den Bereich der Niche MI und für die tonige Fazies des Opalinustons recht umfangreiche Datenbasis zu ergänzen.
- (4) In Zukunft durchzuführende in situ-Untersuchungen sollten sich eher nicht auf den Bereich der Niche MI beziehen, sondern sich auf andere, innerhalb des URL Mont Terri gelegene Gebirgsbereiche konzentrieren, um so einen umfassenden Datensatz zu schaffen, der eine objektivere Einschätzung des Trag- und Deformationsverhaltens von Bohrlöchern in den unterschiedlichen Faziestypen des Opalinustons ermöglicht.

9.3 Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse zu den Bohrlochobservationsarbeiten im URL Tournemire

Die Bohrlochobservationsarbeiten innerhalb des URL Tournemire sind vom LfD&G im Jahr 2007 im Rahmen der Forschungsarbeiten zu *Lux et al. (2012)* begonnen worden und im Rahmen dieses Vorhabens im Jahr 2014 beendet worden. Nachfolgend werden die wichtigsten Erkenntnisse, die innerhalb des insgesamt mehr als sechseinhalb Jahre lang andauernden Observationszeitraums vom 26.09.2007 bis zum 14.05.2014 vom LfD&G in den acht unterschiedlichen innerhalb des URL Tournemire gelegenen Observationsbohrlöchern generiert worden sind, zusammengefasst. Die wichtigsten Erkenntnisse zum observierten geomechanischen und geohydraulischen Verhalten der acht innerhalb des URL Tournemire gelegenen Observationsbohrlöcher lauten wie folgt:

- (1) Die Lokation der Observationsbohrlöcher innerhalb des URL Tournemire sowie die Orientierung der Bohrlöcher gegenüber dem Schichtungsgefüge des Toarcium-Tongesteins haben einen signifikanten Einfluss auf das geohydraulische und das geomechanische Verhalten der Observationsbohrlöcher.
- (2) Innerhalb der Gallery 96 erweisen sich zwei der drei GEM-Observationsbohrlöcher über den gesamten, mehr als sechseinhalb Jahre lang andauernden Observationszeitraum hinweg als über ihre gesamte Länge ohne lokale Ausnahmen standfest.



- (3) Vier der fünf innerhalb der Gallery 08 abgeteuften GSM-Observationsbohrlöcher erweisen sich über den gesamten, mehr als viereinhalb Jahre lang andauernden Observationszeitraum hinweg ebenfalls über ihre Länge ohne lokale Ausnahmen als standfest.
- (4) Somit sind nur innerhalb von zwei der insgesamt acht Observationsbohrlöcher partielle Verbrüche der Bohrlochkontur zu beobachten gewesen.
- (5) Bei den beiden von Schädigungen der Bohrlochwand betroffenen Observationsbohrlöchern handelt es sich um die (näherungsweise) schichtungsparallel abgeteuften Bohrlöcher GEM 90 und GSM 90. Während es im Observationsbohrloch GEM 90 zur Ausbildung eines klassischen Schichtflächenversagens in großen Bohrlochteufenbereichen kommt, ereignet sich innerhalb des Observationsbohrlochs GSM 90 ein nicht schichtflächenbedingtes Herauslösen von Gestein aus der Bohrlochwand in einem entlang der Bohrlochlängsachse klar abgrenzbaren und relativ kurzen Teufenbereich.
- (6) In keinem der drei GEM-Observationsbohrlöcher ist ein Zutritt von freiem Sickerwasser zu beobachten. Während die Observationsbohrlöcher GEM 180 und GEM 270 darüber hinaus auch über den gesamten Observationszeitraum hinweg eine vollständig trockene Bohrlochwand aufweisen, ist die Bohrlochwand des Observationsbohrlochs GEM 90 über große Teile des Observationszeitraums hinweg und in den meisten Teufenbereichen am ehesten als leicht feucht zu charakterisieren.
- (7) In keinem der GEM-Observationsbohrlöcher ist ein Konvergenzprozess oder irgendein anderer zeitabhängiger Deformationsprozess der Bohrlochkontur anhand der Messungen mittels der Dreiarmkalibersonde festzustellen.
- (8) Insgesamt betrachtet zeigen die drei in der Gallery 96 gelegenen GEM-Observationsbohrlöcher innerhalb des gesamten mehr als sechseinhalb Jahre lang andauernden Observationszeitraums bezüglich ihres zeitabhängigen geomechanisch-geohydraulisch gekoppelten Verhaltens keinerlei unerwartete Entwicklungen wie beispielsweise einen verstärkten Wasserzutritt ab einem bestimmten Observationszeitpunkt oder instantan eintretende Einzelereignisse wie beispielsweise größere Gesteinsabplatzungen aus der Bohrlochwand heraus oder Bohrlochkonturverbrüche.
- (9) Eine vergleichbare Aussage bezüglich der Konstanz der Entwicklung des zeitabhängigen geomechanisch-geohydraulisch gekoppelten Verhaltens lässt sich für die innerhalb der Gallery 08 gelegenen GSM-Observationsbohrlöcher auf Basis der durchgeführten Ob-



servationsarbeiten nicht treffen, denn im Rahmen der Observationsarbeiten sind interessante Entwicklungen sowohl in Bezug auf das zeitabhängige Deformationsverhalten sowie auch in Bezug auf die zeitabhängige Entwicklung des geohydraulischen Verhaltens der GSM-Observationsbohrlöcher zu beobachten gewesen.

- (10) Die hydraulische Situation in den westlich der Hauptstörungszone des URL Tournemire in der Gallery 08 gelegenen GSM-Bohrlöchern gestaltet sich mit observierbaren Wasserzutritten in allen fünf Observationsbohrlöchern grundlegend anders als in den östlich der Hauptstörungszone gelegenen, überwiegend trockenen GEM-Observationsbohrlöchern.
- (11) Abgesehen vom Zeitpunkt ihres Abteufens sind mit Ausnahme des Bohrlochs GSM 90 die Bohrlochwände aller GSM-Observationsbohrlöcher über den gesamten Observationszeitraum hinweg am ehesten als leicht feucht zu charakterisieren.
- (12) Innerhalb des schichtungparallelen Observationsbohrlochs GSM 90 ereignet sich dagegen im Verlauf des Observationszeitraums ein starker Wasserzutritt in das Bohrloch hinein, der zur Folge hat, dass weite Teile der Bohrlochwand des Bohrlochs GSM 90 nicht mehr nur leicht, sondern eher stark durchfeuchtet werden. Nachdem zunächst ein deutlicher Feuchtigkeitszutritt zwischen dem 10.05.2010 und dem 08.10.2010 festzustellen ist, lässt die hydraulische Aktivität innerhalb des Bohrlochs bis zum 23.11.2011 zunächst nach. Ab dem 23.05.2012 sind erneut große Mengen von Sickerwasser innerhalb des Observationsbohrlochs festzustellen und die Menge von im Bohrloch enthaltenem freiem Sickerwasser nimmt bis zum Ende des Observationszeitraums hin zu.
- (13) Neben dem schichtungparallel verlaufenden Observationsbohrloch GSM 90 ist auch das abwärts gerichtete Observationsbohrloch GSM 135 von einem Zutritt erheblicher Mengen von freiem Sickerwasser betroffen.
- (14) In den drei weiteren GSM-Observationsbohrlöchern können zu einigen Observationszeitpunkten ebenfalls geringere Mengen an zugesickertem Wasser observiert werden.
- (15) Innerhalb aller vier nach dem 10.05.2010 mit der Dreiarmskalibersonde befahrbaren GSM-Observationsbohrlöcher (GSM 45, GSM 135, GSM 225, GSM 315) ist für den Zeitraum zwischen dem 10.05.2010 und dem 08.10.2010 eine Konvergenz der Bohrlochkontur festgestellt worden.



- (16) Im weiteren Verlauf des Observationszeitraums hat sich keine Fortsetzung der zwischen dem 10.05.2010 und dem 08.10.2010 identifizierten Konvergenzprozesse feststellen lassen. Vielmehr lassen die mittels der Dreiarmkalibersonde generierten Messergebnisse auf eine Stagnation der Konvergenzprozesse in den vier Observationsbohrlöchern GSM 45, GSM 135, GSM 225 und GSM 315 schließen.
- (17) Die Tatsache, dass im Verlauf des ca. viereinhalb Jahre lang andauernden Observationszeitraums innerhalb der vier Observationsbohrlöcher GSM 45, GSM 135, GSM 225 und GSM 315 offenbar lediglich zwischen dem 10.05.2010 und dem 08.10.2010 ein Konvergenzprozess stattgefunden hat, führt zu der Annahme, dass die beobachteten Konvergenzprozesse nicht auf lediglich geomechanische Ursachen wie beispielsweise durch den Sekundärspannungszustand im Gebirge in der Umgebung des Bohrlochs induzierte zeitabhängige Deformationsprozesse allein zurückzuführen sein können, sondern dass aller Voraussicht nach mit der Re-Sättigung des zunächst durch den Bohrvorgang ausgetrockneten Gebirges in der Umgebung der Bohrlöcher einhergehende geomechanisch-geohydraulisch gekoppelte Effekte für die Bohrlochkonvergenzen zwischen dem 10.05.2010 und dem 08.10.2010 verantwortlich sind (Aufweichung des Gesteins durch den Wiederaufsättigungsprozess (*softening*) und damit einhergehende Deformations- und Spannungsumlagerungsprozesse). Nachlassende hydraulische Aktivitäten mit geringeren Mengen von zusickerndem Gebirgswasser könnten im Anschluss dazu geführt haben, dass die wiederaufsättigungsbedingten Aufweichungsprozesse im Gestein der Bohrlochwände der vier durchgängig mit der Dreiarmkalibersonde befahrbaren GSM-Bohrlöcher zum Erliegen gekommen sind oder dass gegebenenfalls sogar wieder Austrocknungs- und Verfestigungsprozesse im Gestein der Bohrlochwände eingetreten sind.
- (18) Während aus der kombinierten Betrachtung der Ergebnisse der Observation der GSM-Bohrlöcher mittels Dreiarmkalibersonde und Axial-Bohrlochkamera für die Observationsbohrlöcher GSM 45, GSM 225 und GSM 315 sowie in eingeschränktem Maße auch für das nur bis zum 23.05.2012 zu Observationszwecken zur Verfügung stehende Bohrloch GSM 135 ein Nachlassen der hydraulischen Aktivität sowie eine vermutlich mit dem Nachlassen der hydraulischen Aktivität einhergehende Stagnation des Konvergenzprozesses beobachtet werden kann (Stabilisierung der mechanischen und hydraulischen Bedingungen), ist für das Observationsbohrloch GSM 90 eine Destabilisierung der geo-



hydraulischen Situation mit einem starken Sickerwasserzutritt in das Bohrloch hinein zu verzeichnen.

- (19) Der zwischen dem 23.11.2011 und dem 23.05.2012 zunächst vergleichsweise langsam beginnende Wasserzutritt scheint sich zwischen dem 23.05.2012 und dem 28.08.2013 in einer Phase, in der die hydraulischen Prozesse in den weiteren observierten GSM-Bohrlöchern klar erkennbar nachlassen, deutlich zu beschleunigen.
- (20) Somit zeigen die innerhalb der GSM-Bohrlöcher generierten Observationsergebnisse eindrucksvoll zwei konträre Entwicklungen mit einer Abnahme der hydraulischen Aktivität und der Deformationsprozesse des Gebirges in der Umgebung der Bohrlöcher im überwiegenden Teil der GSM-Bohrlöcher (GSM 45, GSM 225 und GSM 315 sowie im eingeschränkten Maße auch GSM 135) sowie mit einer starken Zunahme der hydraulischen Aktivität innerhalb des Observationsbohrlochs GSM 90 auf.
- (21) Die Tatsache, dass der Wasserzutritt innerhalb des Observationsbohrlochs GSM 90 sich in einem Zeitraum ereignet, in dem innerhalb der weiteren GSM-Observationsbohrlöcher die Re-Sättigungsprozesse des Gesteins entlang der Bohrlochwand tendenziell abgeschlossen zu sein scheinen, führt zu der Annahme, dass der Wasserzutritt in das Bohrloch GSM 90 hinein sich entlang von bevorzugten Wegsamkeiten ereignet haben muss. Prädestiniert für die Ausbildung von bevorzugten Wegsamkeiten für Wasser im Gebirge scheinen insbesondere die Teufenbereiche zu sein, in denen es entlang von prä-existenten Strukturen, die gegebenenfalls durch ein Kluft- oder Trennflächengefüge hervorgerufen werden, zu einem Verbruch der Bohrlochwand gekommen ist.
- (22) Zwar nicht anhand der durchgeführten Bohrlochobservationsarbeiten belegbar, aber dennoch plausibel scheint ein Szenario, bei dem ein Trennflächengefüge als bevorzugte Wegsamkeit für Gebirgswasser aus einem wie auch immer gearteten tiefer im Gebirge gelegenen Reservoir gedient hat. Das Trennflächengefüge könnte zunächst durch das Abteufen des Bohrlochs GSM 90 aktiviert worden sein und sich später durch die im Rahmen der Bohrlochobservationsarbeiten identifizierten Bohrlochwandverbrüche noch weiter aufgeweitet haben, sodass das Gebirgswasser aus dem tiefer im Gebirge gelegenen Reservoir mit einigen Monaten bis Jahren Verzögerung entlang des aufgeweiteten Trennflächengefüges dem Bohrloch zugesickert sein könnte.
- (23) ***Unabhängig davon, welche Mechanismen im Detail für den starken Wasserzutritt in das Observationsbohrloch GSM 90 hinein verantwortlich sind, stellt das um einige***



Jahre verzögert eintretende Zutreten von Wasser in einen untertägigen Hohlraum entlang von einem zunächst eher als wenig auffällig zu charakterisierenden Trennflächengefüge in einer grundsätzlich als sehr gering wasserdurchlässig beschriebenen Tongesteinsformation wie der innerhalb des URL Tournemire anstehenden Toarcium-Formation aus endlagertechnischer Sicht nahezu ein Worst-Case-Szenario dar, da sich übertragen auf die großmaßstäblichen Hohlräume eines Grubengebäudes zur Endlagerung radioaktiver Abfälle ein derartiger zeitverzögerter Wasserzutritt gegebenenfalls auch erst nach der Erkundungsphase und somit dann in der Betriebsphase oder auch noch später erst nach Verschluss des Endlagers in die noch offenen bzw. auch schon versetzten Strecken und Kammern hinein ergeben könnte.

9.4 Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse zu den laborativen Untersuchungen an Opalinustonprüfkörpern aus dem URL Mont Terri

Als eines der wichtigsten Ergebnisse bezüglich der im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführten laborativen Untersuchungen ist die Tatsache zu nennen, dass es gelungen ist, Prüfkörper aus der sandigen sowie aus der karbonatreichen sandigen Fazies des Opalinustons zu gewinnen. Beide Opalinustonfaziestypen sind bisher kaum bezüglich ihrer mechanischen Gebirgseigenschaften untersucht worden. Im Rahmen der laborativen Untersuchungen konnten neben sechs Kurzzeitfestigkeitsversuchen an Prüfkörpern aus der tonigen Opalinustonfazies sechs Kurzzeitfestigkeitsversuche an Prüfkörpermaterial aus der karbonatreichen sandigen Opalinustonfazies und drei Kurzzeitfestigkeitsversuche an Prüfkörpern aus der sandigen Opalinustonfazies durchgeführt werden. Die wichtigsten Erkenntnisse aus den durchgeführten Kurzzeitfestigkeitsversuchen werden nachfolgend stichpunktartig aufgeführt und lauten wie folgt:

- (1) Bezüglich der Z-Prüfkörper aus der tonigen Opalinustonfazies ergibt sich eine insgesamt sehr gute Übereinstimmung zwischen den in *Bock (2009)* dokumentierten Ergebnissen und den an den Z-Prüfkörpern aus der tonigen Fazies im Bereich des Bohrlochs BDM-B1 erhaltenen laborativen Ergebnissen.
- (2) Für das Z-Prüfkörpermaterial aus der karbonatreichen sandigen Fazies sind bei Mantelspannungen von $\sigma_{2,3} = 0$ MPa und $\sigma_{2,3} = 2$ MPa minimal kleinere Scherfestigkeiten ermittelt worden als für das Z-Prüfkörpermaterial aus der tonigen Fazies.



- (3) Für eine Mantelspannung von $\sigma_{2,3} = 4$ MPa ist eine deutlich höhere Scherfestigkeit des Z-Prüfkörpers aus der karbonatreichen sandigen Fazies gegenüber dem Prüfkörper aus der tonigen Fazies festzustellen.
- (4) Das Z-Prüfkörpermaterial aus der sandigen Opalinustonfazies weist für Mantelspannungen von $\sigma_{2,3} = 0$ MPa und $\sigma_{2,3} = 2$ MPa deutlich höhere Scherfestigkeiten auf als das Prüfkörpermaterial aus den beiden anderen Faziestypen.
- (5) Bemerkenswerterweise unterscheidet sich die axiale Belastbarkeit des unter einer Mantelspannung von $\sigma_{2,3} = 4$ MPa untersuchten Z-Prüfkörpers aus der sandigen Opalinustonfazies jedoch kaum von der ertragbaren axialen Belastung unter einer Mantelspannung von $\sigma_{2,3} = 2$ MPa.
- (6) Somit legen die laborativen Ergebnisse, die an Z-Prüfkörpern aus der karbonatreichen sandigen und aus der sandigen Fazies erhalten worden sind, eine gewisse Inhomogenität des Gebirges in den beiden bisher nur wenig erforschten Faziestypen nahe.
- (7) Bezüglich der P-Prüfkörper aus der tonigen Fazies ist eine gute Korrelierbarkeit zu den in *Bock (2009)* angegebenen Scherfestigkeitsparametern festzustellen, wobei die Scherfestigkeit der drei im Rahmen dieses Vorhabens beprobten Prüfkörper insgesamt unabhängig von der gewählten Mantelspannung etwas unterhalb von den in der Literatur angegebenen Scherfestigkeiten liegt.
- (8) Im einaxialen Kurzzeitfestigkeitsversuch weist der S-Prüfkörper aus der karbonatreichen sandigen Fazies eine klar erkennbar höhere Kurzzeitfestigkeit als der P-Prüfkörper aus der tonigen Fazies auf.
- (9) Die bei Mantelspannungen von $\sigma_{2,3} = 2$ MPa und $\sigma_{2,3} = 4$ MPa für die S-Prüfkörper aus der karbonatreichen sandigen Fazies generierten Resultate sind nur sehr schwer interpretierbar, da bei einer Mantelspannung von $\sigma_{2,3} = 2$ MPa eine deutlich höhere axiale Belastbarkeit ermittelt worden ist als bei einer Mantelspannung von $\sigma_{2,3} = 4$ MPa.
- (10) ***Die Ergebnisse der laborativen Untersuchungen von insgesamt neun Prüfkörpern aus der sandigen und der karbonatreichen sandigen Fazies zeigen auf, dass es zur hinreichend zuverlässigen Ermittlung der gebirgsmechanischen Eigenschaften der sandigen und der karbonatreichen sandigen Fazies in Zukunft zunächst erforderlich ist, weit- aus umfangreichere laborative Untersuchungen durchzuführen.***



Neben den insgesamt 15 Kurzzeitfestigkeitsversuchen sind im Rahmen dieses Vorhabens sieben einaxiale Dauerstandversuche mit einer Regelung der Umgebungsluftfeuchtigkeit und ein triaxialer Dauerstandversuch gefahren worden. Insgesamt lassen sich aus den durchgeführten einaxialen Dauerstandversuchen die folgenden zentralen Erkenntnisse ableiten:

- (1) *Für den Untersuchungsbereich der Umgebungsluftfeuchten von $50 \% \leq RH \leq 90 \%$ konnte kein eindeutiges kontinuierlich ablaufendes zeitabhängiges Deformationsverhalten im Sinne eines stationären Kriechens, wie es etwa für Steinsalz bekannt ist, identifiziert werden.*
- (2) Bereits kurz nach der Lasterhöhung bei Beginn einer neuen Laststufe nehmen die Verzerrungs-Zeit-Graphen unabhängig von der aufgetragenen Axialspannung (4 MPa bis 12 MPa) und somit unabhängig von der vorherrschenden deviatorischen Belastung einen (nahezu) horizontalen Verlauf an.
- (3) Des Weiteren ist aus dem Verlauf der Verzerrungs-Zeit-Graphen auch kein Konsolidationsprozess abzuleiten, der auch zu einer längerfristigen zeitabhängigen, von Gesteinspermeabilität und Beanspruchungsniveau abhängigen Deformation führen würde.
- (4) Für den Untersuchungsbereich der Umgebungsluftfeuchten von $50 \% \leq R_H \leq 90 \%$ konnte keine Korrelation zwischen dem Deformationsverhalten (weder instantan noch zeitabhängig) und der Umgebungsluftfeuchtigkeit hergestellt werden.
- (5) Einen weitaus dominanteren Einfluss insbesondere auf das instantane Deformationsverhalten scheint die Teufe zu haben, aus der das Prüfkörpermaterial entnommen worden ist. Aus geringeren Teufen und damit näher zur Strecke entnommene Prüfkörper neigen zu deutlich größeren instantanen Deformationen insbesondere während der ersten Belastungsphase (→ Gebirgsentfestigung durch Streckenauffahrung?).
- (6) *Die bei einer Umgebungsluftfeuchtigkeit von $RH \geq 95 \%$ laborativ untersuchten Prüfkörper aus größerer Teufe weisen ein grundsätzlich anderes zeitabhängiges Deformationsverhalten auf als die bei geringeren Umgebungsluftfeuchten beprobten Prüfkörper. Offensichtlich bedingt durch Quelleffekte kommt es nach einer instantanen Stauchung der Prüfkörper auch unter vergleichsweise hohen axialen Belastungen (8 MPa) zu einer kontinuierlich voranschreitenden Prüfkörperextension.*

Die wichtigsten Erkenntnisse aus dem durchgeführten triaxialen Dauerstandversuch lauten wie folgt:



- (1) Die zeitabhängigen Deformationsprozesse kommen scheinbar innerhalb des Versuchszeitraums vollständig zum Erliegen. Insbesondere im Bereich der letzten 116 Tage der insgesamt $\Delta t = 386$ d lang andauernden Versuchsdurchführung weist der Verzerrungs-Zeit-Graph einen näherungsweise horizontalen Verlauf auf.
- (2) Anhand der durchgeführten Untersuchungen konnte kein Hinweis auf einen Austritt von Porenwasser aus dem Prüfkörper während der Versuchsdurchführung identifiziert werden.
- (3) Somit kann auf der Grundlage des triaxialen Dauerstandversuchs unter Kompressionsbeanspruchung weder bestätigt noch widerlegt werden, dass ein Zusammenhang besteht zwischen dem Porenwasserüberdruckabbau in den Porenräumen des Prüfkörpers und dem makroskopisch messtechnisch erfassbaren zeitabhängigen Deformationsverhalten des Opalinuston-Prüfkörpers.
- (4) *Das beobachtete, im Lauf der Zeit monoton abnehmende Deformationsverhalten des Prüfkörpers kann als ein erstes Indiz gegen das Auftreten von stationären zeitabhängigen Deformationsprozessen im Opalinuston gewertet werden (Konsolidationsprozess?).*
- (5) *Um eine allgemeingültige und belastbare Aussage bezüglich des zeitabhängigen Deformationsverhaltens für Opalinuston aus der Lokation URL Mont Terri insbesondere in Bezug auf die Frage nach einem stationären Deformationsverhalten (= stationäres Kriechen?) formulieren zu können, ist jedoch in Zukunft die Durchführung einer größeren Anzahl von weiteren triaxialen Langzeitkompressionsversuchen mit Standzeiten von $\Delta t > 1$ a an Opalinuston-Prüfkörpern aus dem URL Mont Terri notwendig.*
- (6) Bei der Durchführung zukünftiger laborativer Forschungsarbeiten zum Langzeitdeformationsverhalten von Opalinuston sollte insbesondere dem Sättigungsgrad des Prüfkörpers und der direkten Messung des Porenwasserdrucks vertiefende Beachtung zukommen.

9.5 Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse aus der Entwicklung des FTK-Simulators und den numerischen Untersuchungen zur Verifizierung und Validierung des FTK-Simulators

Die rechenzeitbezogene Effizienz der Software FLAC^{3D}, die vom LfD&G bis dato für einphasig-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnungen verwendet worden ist und die am LfD&G in den vergangenen Jahren um eine Vielzahl von eigenen mechanischen Stoffmodel-



len erweitert und somit wirtsgesteinsspezifisch spezialisiert worden ist, wird durch den programmintern verfahrensbedingt gesteuerten hydraulischen Zeitschritt insbesondere bei HM-gekoppelten Langzeitsimulationen mit zonenzahlenmäßig großen Berechnungsmodellen stark abgemindert. Des Weiteren ist bekannt, dass mit der Vernachlässigung von Zweiphasenflussprozessen relevante, in einem Endlager ablaufende Vorgänge nicht erfasst und im Berechnungsmodell abgebildet werden können. Der ebenfalls am LfD&G vorliegende und auf zwei-dimensionale Modellgeometrien beschränkte Simulator FLAC unterstützt zwar zweiphasig-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnungen, aber Vergleichsberechnungsläufe haben während der Bearbeitungszeit dieses Vorhabens gezeigt, dass zum einen die Dauer dieser Art von Simulationen bei FLAC extrem lang ist und dass zum anderen eingeschränkte Simulatoroptionen in FLAC zu nicht reproduzierbaren Berechnungsergebnissen aus Vergleichsberechnungen mit anderen Simulatoren führen können.

Im Rahmen dieses Forschungsvorhabens ist es nun gelungen, mit dem $\text{FLAC}^{3\text{D}}$ -TOUGH2-Kopplungs-Simulator einen funktionstüchtigen und mit Blick auf Qualität und Simulationsdauer ausgesprochen leistungsfähigen Simulator zu entwickeln, mit dem thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Analysen von Endlager(teil)systemen durchführbar sind. Der die zeitliche Effizienz des FTK-Simulators verschlechternde Einfluss des bei der sequenziellen Kopplung anfallenden erhöhten Datenaustausches zwischen den Programmen $\text{FLAC}^{3\text{D}}$ und TOUGH2 wird bei HM-Langzeitsimulationen durch die bei Annäherung an den hydraulisch stationären Zustand stark verminderte Notwendigkeit von hydraulischen Teilsimulationen (\rightarrow deutlich weniger Datenaustausch) in Verbindung mit einer beschleunigten mechanischen Zustandsausbalancierung überkompensiert. Auch Zweiphasenflussprozesse mit den Komponenten Wasser/Luft oder auch Wasser/Wasserstoff können mit dem FTK-Simulator berücksichtigt werden. Gleichwohl besteht noch Verbesserungspotenzial hinsichtlich der Einbeziehung von bis dato noch nicht realisierten Prozessen in den FTK-Simulator (wichtig: hydraulische Anisotropie im Tonstein) oder der Optimierung von Konzepten (z.B. Zeitsteuerungsalgorithmus).

Mit dem neu entwickelten FTK-Simulator sind sowohl hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnungen unter der Annahme der Ausbildung eines Einphasenflusses im Gebirge wie auch hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnungen unter der Annahme der Ausbildung eines Zweiphasenflusses im Gebirge durchgeführt worden. Die Berechnungen zum Einphasenfluss haben primär der Validierung des FTK-Simulators anhand der Gegenüberstellung



von mit dem FTK-Simulator und mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ generierten Berechnungsergebnissen gedient. Die hydraulisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen zum Zweiphasenfluss sind durchgeführt worden, um die komplexe gebirgsmechanische Situation in der Umgebung des Observationsbohrlochs BDM-B1 mit der Ausbildung eines teilgesättigten Porenraumes numerisch abzubilden. Die Resultate der numerischen Simulation zum Zweiphasenfluss sind im Rahmen eines Benchmarktests mit unter Verwendung des Simulators CODE_BRIGTH generierten Berechnungsergebnissen verglichen worden und darüber hinaus Messergebnissen aus dem DM-B-Experiment gegenübergestellt worden.

Die wichtigsten Erkenntnisse, die bei der Entwicklung des FTK-Simulators gewonnen werden konnten, und damit einhergehend die bewältigten Hürden und auch die Stellen, an denen noch Verbesserungspotenzial besteht, sind wie folgt zu benennen:

- (1) ***Die Simulatoren $FLAC^{3D}$ (mechanische Prozesse) und TOUGH2 (thermohydraulische Prozesse) sind über selbstentwickelte Kopplungsfunktionen zu einem neuen Simulator mit der Bezeichnung FTK-Simulator (thermohydraulisch-mechanische Prozesse) weiterentwickelt worden. Die implementierten Kopplungsfunktionen und die zugehörigen iterativen Lösungsverfahren arbeiten korrekt. Die Verifikationsarbeiten haben gezeigt, dass der FTK-Simulator grundsätzlich in der Lage ist, hydraulisch-mechanische Aufgabenstellungen korrekt zu analysieren. Die Übereinstimmung von Berechnungsergebnissen mit analytischen Lösungen zu HM-gekoppelten Einphasenflussprozessen kann Abschnitt 6.4.2 und den dort behandelten einfacheren Modellbeispielen zufolge als sehr gut eingestuft werden. Auch der Vergleich an größeren Berechnungsmodellen mit Berechnungsergebnissen mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ ist zufriedenstellend ausgefallen (siehe dazu weiter unten).***
- (2) Unterschiedliche „EOS“-Module legen im Programm von TOUGH2 die verwendeten physikalischen Modellierungsansätze für die H- oder TH-Simulation fest (Strömungsgleichungen, Phasen, Komponenten, physikalische Kennwerte, druck- und temperaturabhängige Fluideigenschaften, An-/Isothermie etc.). Die Implementierung der FTK-Funktionen zur Simulatorkopplung des LfD&G ist darauf ausgerichtet, den Simulator $FLAC^{3D}$ mit mehreren unterschiedlichen Modulen des Simulators TOUGH2 koppeln zu können. Gegenwärtig bietet der FTK-Simulator daher die Möglichkeit der mit den mechanischen Prozessen gekoppelten Simulation (a) von isothermen Einphasenflussprozessen mit Berücksichtigung einer Teilsättigung (*Richards*-Gleichung, EOS-Modul 9) so-



- wie (b) von wahlweise isothermen oder anisothermen Zweiphasenflussprozessen mit den Komponenten Wasser und Luft (EOS-Modul 3) bzw. Wasser und Wasserstoff (EOS-Modul 5). Mit entsprechenden programmiertechnischen Ergänzungen sind somit auch weitere EOS-Module an den geomechanischen Simulator FLAC^{3D} koppelbar.
- (3) Für gekoppelte oder ungekoppelte Zweiphasenflussprozesse haben beim LfD&G weder analytische Lösungen noch Simulatoren, mit denen sinnvolle Vergleichsberechnungen möglich gewesen wären, vorgelegen. Ein in Abschnitt 6.3.5 beschriebener Vergleich der Berechnungsergebnisse der Simulatoren FTK und FLAC mit Berechnungsergebnissen aus *Kühle et al. (1999)* (Simulator MUFTE-Thermo) für ein dort vorgestelltes zweiphasig-hydraulisches Modellbeispiel hat zu einer sehr guten Übereinstimmung der mit dem FTK-Simulator erhaltenen Ergebnisse mit den dort präsentierten Ergebnissen geführt. Die Vergleichsberechnung mit FLAC hat extrem große Simulationszeiten beansprucht, so dass auf diese Weise nur ein Bruchteil der mit den anderen beiden Programmen simulierten Zeiträume simuliert werden konnte.
 - (4) Mithilfe der FLAC^{3D}-eigenen Funktionalitäten zur Modellerstellung und Ergebnisauswertung (Prä- und Postprozessor) ist es über die vom LfD&G implementierten FTK-Funktionen möglich, thermohydraulische TOUGH2-Berechnungen mit dem FTK-Simulator durchzuführen („TOUGH2 aus FLAC^{3D}-Funktionalität). Dabei erhöht die auch nach einem numerisch bedingten Absturz von TOUGH2 anschließend fortgesetzte Abarbeitung des FTK-Programms mit einem erneuten TOUGH2-Aufruf mit anderen Zeitschritten die Robustheit des Simulators gegenüber dem programmtechnisch ungekoppelten TOUGH2-Simulator.
 - (5) Die Modelldiskretisierungen für FLAC^{3D} und TOUGH2 müssen unterschiedlichen Anforderungen genügen. Es ist allerdings sehr aufwendig und schwierig, eine Diskretisierung zu finden, die gleichzeitig zu beiden Simulatoren optimal konform ist. Selbst wenn eine solche Diskretisierung gelingt, so wäre sie nach einer mechanisch induzierten Deformation des Berechnungsmodells nicht mehr für beide Simulatoren identisch aktualisierbar. Als Ausweg kann eine aus dem mit dem FLAC^{3D}-Präprozessor erstellten Modell durch ein externes Zusatzprogramm berechnete Paralleldiskretisierung eingesetzt werden, wobei eine systematische Quantifizierung des Einflusses der so erfolgten Diskretisierung auf die relevanten Zustandsgrößen jedoch bis dato noch nicht vorgenommen worden ist.



- (6) Bei starken Änderungen des thermohydromechanischen Zustands im Berechnungsmodell ist es ratsam, die einzelnen Teilberechnungen mit FLAC^{3D} und mit TOUGH2 über kürzere zu simulierende Zeiträume durchzuführen (→ hohe Kopplungsfrequenz), um begründet durch die sequenzielle Natur der Simulatorkopplung eine bestmögliche Reaktion der geomechanischen Prozesse auf die thermohydraulischen Prozesse und umgekehrt zu erlauben. Die Entwicklung einer Strategie für die Steuerung dieser Kopplungsfrequenz anhand von numerischen Kriterien basierend auf den Teilberechnungsergebnissen aus FLAC^{3D} oder TOUGH2 hat sich dabei aber als nichttrivial herausgestellt. Während der Bearbeitungszeit des Vorhabens sind unterschiedliche Algorithmen zur Umsetzung einer solchen Strategie implementiert und später nachgebessert oder wieder verworfen worden, weil sie aus vielerlei Gründen nicht hinreichend zuverlässig funktioniert haben. Die bis dato final erhaltenen Algorithmen haben zumindest für die Berechnungen, für die sie eingesetzt worden sind, zufriedenstellend funktioniert. An dieser Stelle besteht jedoch auch weiterhin noch Entwicklungsbedarf.
- (7) Ebenfalls nichttrivial erscheint der Einbau einer Methode, um das in FLAC^{3D} aufbringbare Schichtungsflächengefüge (mechanische Anisotropie) geeignet nach TOUGH2 zu transportieren (hydraulische Anisotropie). In TOUGH2 sind je Materialbereich – Gesteinsschicht, Verfüllmaterial, EDZ o.ä. – lediglich drei Zahlenwerte für Permeabilitäten angebar, und jede Verbindung zwischen zwei Zonen muss eine dieser drei Zahlenwerte zugewiesen bekommen. Endlagersystemmodelle mit einem Streckennetzwerk, Kammern und/oder Großbohrlöchern sind aber in der Regel nicht schichtflächenparallel diskretisiert, so dass die in jedem Materialbereich auftretenden Verbindungspermeabilitäten eine deutlich höhere Variabilität aufweisen und somit nicht adäquat durch die jeweils drei vorgegebenen Zahlenwerte abgebildet werden können. Mit Blick auf das im Tongestein stets vorhandene Schichtungsflächengefüge ist die Erarbeitung einer Lösung für dieses Defizit am dringendsten von allen hier aufgeführten Defiziten.
- (8) Da zur Behebung dieses Defizites der hydraulischen Anisotropie nach derzeitigem Erfahrungsstand voraussichtlich umfangreiche Modifikationen am Fortran-Quellcode von TOUGH2 erforderlich sein werden, kann damit aufgrund der Ähnlichkeit in der mathematischen Formulierung der hydraulischen und thermischen Strömungsprozesse zeitgleich möglicherweise auch eine Implementierung von Codestrukturen zur Realisierung einer thermischen Anisotropie verbunden werden.



- (9) Im Rahmen der Auseinandersetzung mit dem Simulator TOUGH2 ist beim LfD&G das Verständnis für die eher komplexen Zweiphasenflussprozesse und Effekte, die aus diesen Prozessen herrühren, deutlich gewachsen, so dass auch eher unintuitive Vorgänge erklärt werden konnten. Dennoch befindet sich der Erfahrungsschatz seitens des LfD&G im Bereich des Zweiphasenflusses noch eher am Anfang. Um weitere Erfahrungen in diesem für die Bewertung von Prozessen in einem Endlager – und insbesondere auch bezüglich der Wechselwirkung mit geomechanischen Prozessen – derart bedeutsamen Bereich zu sammeln, ist eine fortgesetzte Kooperation mit externen Organisationen, die auf diese Thematik spezialisiert sind, erforderlich.
- (10) *Erste Verifikationsanalysen geben faszinierende Einblicke in das multiphysikalische Geschehen und lassen bei weiterer Vertiefung und anschließender Validierung tiefere Einblicke in das Langzeitverhalten eines verschlossenen Endlagers erwarten. Hier sind dann für die unterschiedlichen Szenarien insbesondere die fluiddynamischen Prozesse in Verbindung mit den thermomechanischen Prozessen von zentraler Bedeutung.*

Die wichtigsten Erkenntnisse aus den numerischen Berechnungen zum Einphasenfluss und zum Zweiphasenfluss und aus den durchgeführten Ergebnisgegenüberstellungen mit den Simulatoren FLAC^{3D} und CODE_BRIGTH werden nachfolgend nochmals stichpunktartig zusammengefasst. Sie lauten wie folgt:

- (1) Der in Abschnitt 6.4.3 ausführlich beschriebene Ergebnisvergleich zwischen mit dem FTK-Simulator generierten Berechnungsergebnissen und mit dem Simulator FLAC^{3D} generierten Berechnungsergebnissen zum hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten von untertägigen Hohlräumen unter Verwendung von einem quasi-zweidimensionalen Bohrlochmodell, einem dreidimensionalen Bohrlochmodell zur Simulation des Bohrlochabteufens und einem quasi-zweidimensionalen Streckenmodell hat einen entscheidenden Beitrag zu einer erfolgreichen Verifizierung des FTK-Simulators im Bereich des Einphasenflusses geleistet.
- (2) Somit steht mit dem FTK-Simulator jetzt im Bereich des Einphasenflusses ein leistungsfähiges numerisches Instrument für die Durchführung hydraulisch-mechanisch gekoppelter gebirgsmechanischer Analysen zur Verfügung.
- (3) *Inbesondere die in Abschnitt 6.4.3.8 vorgestellten Simulationsergebnisse der mit dem FTK-Simulator für das dreidimensionale kombinierte Bohrloch-Strecken-Modell*



durchgeführten numerischen Berechnungen verdeutlichen die Leistungsfähigkeit des neu entwickelten Simulators.

- (4) Die mit dem FTK-Simulator unter Verwendung des dreidimensionalen kombinierten Bohrloch-Strecken-Modells durchgeführten numerischen Simulationen haben aufgezeigt, dass mit dem FTK-Simulator aufgrund seiner Leistungsfähigkeit hydraulisch-mechanisch gekoppelte numerische Analysen an einem derart komplexen und bezüglich seiner Zonenanzahl großen Modell, wie es das Bohrloch-Strecken-Modell darstellt, innerhalb von akzeptablen Zeiträumen möglich sind.
- (5) Mit dem FTK-Simulator sind somit in Zukunft hydraulisch-mechanisch gekoppelte numerische Analysen auch unter Verwendung von bezüglich ihrer Zonenanzahl noch weit- aus größeren Modellen als dem hier zum Einsatz gekommenen dreidimensionalen Bohrloch-Strecken-Modell durchführbar, die aufgrund des zu erwartenden Rechenaufwands und den daraus resultierenden zu erwartenden Berechnungszeiträumen mittels des Simulators $FLAC^{3D}$ nicht realisierbar wären (Für die unter Verwendung des dreidimensionalen Bohrloch-Strecken-Modells durchgeführte Berechnung beträgt der Faktor bezüglich der benötigten Rechenzeit mit dem FTK-Simulator und der theoretisch für eine Berechnung mit dem Simulator $FLAC^{3D}$ zu erwartenden Berechnungszeit $F_t \approx 400$).
- (6) In Zukunft wird somit durch die Leistungsfähigkeit des FTK-Simulators auch das hydraulisch-mechanisch gekoppelte zeitabhängige Verhalten von filigranen Tragwerkskomponenten komplexer Gesamtsysteme im Rahmen einer numerischen Analyse abbildbar sein. Bei derartigen filigranen Teilstrukturen kann es sich beispielsweise um Observationsbohrlöcher im mechanischen und hydraulischen Nahfeld einer oder mehrerer Strecken handeln, wie sie im Rahmen dieses Vorhabens betrachtet worden sind, oder aber auch um Einlagerungsbohrlöcher in einem Endlagerbergwerk, die in ihrem hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten durch das Grubengebäude beeinflusst werden.
- (7) Die gute numerische Abbildbarkeit des Tragverhaltens von Bohrlöchern und anderer untertägiger Hohlräume beschränkt sich in Zukunft zunächst auf die systematisch auftretenden Versagensmechanismen Matrix- und Schichtflächenversagen.
- (8) Die zahlreichen nicht erkennbar systematisch und eher unregelmäßig innerhalb der Observationsbohrlöcher auftretenden, im Rahmen dieses Vorhabens in situ observierten Versagensmechanismen wie beispielsweise Bohrlochwandabschalungen, Gesteinsabplatzungen aus der Bohrlochwand heraus oder durch lokal begrenzte Wasserzutritte be-



dingte Gesteinsaufweichungen mit einhergehenden Bohrlochkonturveränderungen stellen nach wie vor eine große Herausforderung bezüglich ihrer realitätsnahen Abbildbarkeit durch die Anwendung von auf kontinuumsmechanischen Grundsätzen aufbauenden numerischen Simulatoren wie $FLAC^{3D}$ oder eben dem FTK-Simulator dar. Hier besteht weiterer erheblicher Forschungs- und Entwicklungsbedarf.

- (9) Ein entscheidender Aspekt für die Verbesserung der Prognosemöglichkeiten bei der Durchführung von numerischen Simulationen unter Verwendung des FTK-Simulators ist – wie auch hier im Rahmen der numerischen Simulationen festgestellt werden konnte – die Implementierung der Möglichkeit zur Berücksichtigung einer hydraulischen Anisotropie des geschichtet aufgebauten Tongesteins in den FTK-Simulator. Da die schichtungsgefügebedingte hydraulische Anisotropie von Tongesteinsformationen dazu führen kann, dass die hydraulische Permeabilität des Gebirges parallel zur Orientierung des Schichtungsgefüges um eine bis mehrere Größenordnungen höher ist als die hydraulische Permeabilität des Gebirges orthogonal zur Anordnung der Schichtflächen, ist es zur realitätsnäheren Abbildung des geomechanisch-geohydraulisch gekoppelten Verhaltens des Gebirges in der Umgebung von untertägigen Hohlräumen in Tongesteinsformationen unbedingt erforderlich, die Möglichkeit zur Berücksichtigung einer hydraulischen Anisotropie des Gebirges im Rahmen zukünftiger Entwicklungsarbeiten in den FTK-Simulators zu integrieren.
- (10) Während bezüglich der numerischen Berechnungen zum Einphasenfluss eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der zwei zur Durchführung der Berechnungen eingesetzten Simulatoren $FLAC^{3D}$ und FTK-Simulator festgestellt werden konnte, sind bezüglich der numerischen Simulationen zum Zweiphasenfluss zwischen den mittels des FTK-Simulators und den mittels des Simulators `CODE_BRIGHT` generierten Sättigungsgraden des Gebirges und zwischen den mittels der beiden unterschiedlichen Simulatoren generierten Porenwasserdruckverteilungen signifikante Unterschiede identifiziert worden.
- (11) Des Weiteren hat die geomechanische und geohydraulische Komplexität der gebirgsmechanischen Situation in der Umgebung der DM-B-Observationsbohrlöcher zu einem in situ zu beobachtenden hydraulischen Verhalten des Gebirges in der Umgebung des Observationsbohrlochs BDM-B1 geführt, das weder unter Verwendung des FTK-Simula-



tors noch unter Verwendung des Simulators CODE_BRIGHT zufriedenstellend numerisch abgebildet werden konnte.

Aus den im Rahmen der Durchführung der numerischen Untersuchungen zum Ein- und Zweiphasenfluss gewonnenen Erkenntnissen sind die nachfolgend stichpunktartig aufgeführten Forschungs- und Entwicklungsarbeiten als wichtige Schritte für die Optimierung des FTK-Simulators geschlussfolgert worden. Die wichtigsten Schlussfolgerungen bezüglich der in Zukunft vorzunehmenden Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zur Verbesserung des FTK-Simulators lauten wie folgt:

- (1) Der im Rahmen dieses Vorhabens durchgeführte Ergebnisvergleich zwischen dem FTK-Simulator und dem Simulator CODE_BRIGHT berechneten Resultaten verdeutlicht die dringende Notwendigkeit einer weiteren Befassung mit der Thematik der Simulation des Zweiphasenflusses in porösen Medien, wobei einer der Schwerpunkte unbedingt auf der Durchführung weiterer Benchmark-Untersuchungen liegen sollte.
- (2) Für die Zukunft erscheint sowohl die Durchführung weiterer Vergleichsberechnungen zwischen dem FTK-Simulator und dem Simulator CODE_BRIGHT zur Ergründung der Ursachen für die identifizierten Ergebnisdifferenzen sinnvoll wie darüber hinaus auch die Miteinbeziehung weiterer numerischer Simulationsinstrumentarien in weitere Benchmark-Untersuchungen.
- (3) Aufgrund der Komplexität des Aufgabenfeldes der hydraulisch-mechanisch gekoppelten Simulation des Gebirgstrag- und Gebirgsdeformationsverhaltens unter der Annahme der Ausbildung eines Zwei- oder Mehrphasenflusses in den Porenräumen des Gebirges empfiehlt sich eine Vorgehensweise, bei der die Komplexität der numerisch abzubildenden Prozesse ausgehend von einer möglichst einfachen Aufgabenstellung nur schrittweise gesteigert werden sollte.
- (4) Ein erneuter Benchmarktest sollte zunächst an einem in Bezug auf seine Geometrie sowie in Bezug auf die vorherrschenden gebirgsmechanischen Bedingungen möglichst einfachen Modell durchgeführt werden.
- (5) Erst im Anschluss an die im Hinblick auf die Ergebnisgegenüberstellung erfolgreiche Durchführung der Benchmark-Untersuchungen an einem einfachen und am besten auch analytisch nachvollziehbaren Beispiel sollten komplexere in situ-Systeme zur Validierung der Simulationsinstrumentarien in Betracht gezogen werden.



- (6) In Zukunft sollten zur weiteren Validierung des FTK-Simulators sowie zur weiteren Validierung anderer im Rahmen von Benchmarktests eingesetzter Simulatoren Messergebnisse aus geomechanisch weniger komplexen Gebirgsbereichen als dem im Rahmen dieses Vorhabens untersuchten Gebirgsbereich herangezogen werden. Denkbar wäre beispielsweise ein Bohrlochquerschnitt außerhalb des geomechanischen Einflussbereichs jeglicher Strecken und in deutlichem Abstand zu eventuell vorhandenen Faziesübergängen sowie Störungszonen und Klüften im Gebirge. Ein solcher Bohrlochquerschnitt sollte in einem Abstand von $d > 30$ m zur Strecke liegen, von der aus das Bohrloch abgeteuft wird.
- (7) Messdaten zur Validierung des FTK-Simulators können in Zukunft darüber hinaus aus Datensätzen entnommen werden, wie sie im Rahmen von internationalen Projekten wie beispielsweise DECOVALEX-THMC gewonnen werden oder wie sie derzeit im Rahmen des FE-Experimentes im URL Mont Terri generiert werden.
- (8) In zukünftigen Analysen zum hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten eines Tragsystems unter der Annahme der Ausbildung eines Zweiphasenflusses ist der wissenschaftliche Aspekt der Beeinflussung der mechanischen Festigkeits- und Verformungseigenschaften des Tongesteins durch den im Gestein vorherrschenden Feuchtigkeitsgehalt innerhalb der teilgesättigten Gebirgsbereiche zu berücksichtigen und daher zunächst eingehend zu untersuchen (→ entsättigungsbedingte Verfestigungsprozesse mit einer Erhöhung der Gebirgsfestigkeit und der Gebirgssteifigkeit und anschließend bei weiter voranschreitender Entsättigung entfestigungsbedingte Zerfallsprozesse mit Kohäsionsverlust und Rissbildung, → resättigungsbedingte Prozesse wie Entfestigung durch Konsistenzänderung sowie Quellen).
- (9) Bevor weitere Validierungsarbeiten vorgenommen werden, sollte der FTK-Simulator zunächst weiter entwickelt werden, um die im Rahmen der durchgeführten und in den Abschnitten 6.4.3 und 7 beschriebenen numerischen Simulationsarbeiten als notwendig identifizierten Erweiterungen in den Programmcode zu integrieren.

Die identifizierten notwendigen Erweiterungen des FTK-Simulators werden abschließend noch einmal explizit und in aufsteigender Dringlichkeit aufgelistet und sind wie folgt zu benennen:

- (1) Quantifizierung des numerischen Einflusses der Verwendung einer *Voronoi*-Paralleldiskretisierung für TOUGH2 auf die Berechnungsergebnisse und ggf. Modifikation der Vor-



gehensweise, auch mit Blick auf die Tatsache, dass möglicherweise eine Modelldiskretisierung mit weniger einschränkenden Bedingungen für TOUGH2 hinreichend ist – welche allerdings gänzlich neu zu implementieren wäre.

- (2) Erweiterung des FTK-Simulators um ein optional einsetzbares Kriterium zur Steuerung des hydraulischen Zeitschritts, sodass in Zukunft der erfahrene Anwender die Zeitschrittsteuerung individuell an gegebene Erfordernisse anpassen kann, aber gleichzeitig auch der im Umgang mit dem FTK-Simulator unerfahrenere Anwender die Möglichkeit zur sicheren Durchführung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten numerischen Simulationen erhält.
- (3) Integration der Option zur Berücksichtigung einer hydraulischen Anisotropie des Gebirges in den FTK-Simulator. Wie den vorangehenden Ausführungen in Abschnitt 7 zu entnehmen ist, ist die Berücksichtigung der schichtungsgefügebedingten Anisotropie bezüglich der hydraulischen Leitfähigkeit zur realitätsnäheren Abbildung von Porenwasserdruckabsenktrichtern im Gebirge sowie von entsättigten Gebirgsbereichen in der Umgebung von untertägigen Hohlräumen in Tongesteinsformationen aufgrund des stets vorhandenen Schichtflächengefüges dringend erforderlich.

Abschließend ist anzumerken, dass die Durchführung von Benchmarkstudien mit anderen Simulatoren zur weiteren gemeinsamen diskursiven Qualifizierung der für Langzeitsicherheitsanalysen im Tongestein und auch im Salzgestein eingesetzten Simulationsinstrumentarien dringend geboten ist, um zukünftig über auch soweit wie möglich qualitätsgesicherte Simulatoren zu verfügen (→ Verifikation und Validation multiphysikalischer Prozesssimulatoren).



10 Danksagung

Die erfolgreiche Bearbeitung des Forschungsvorhabens ist möglich geworden durch die freundliche Hilfe und Unterstützung von Fachkollegen insbesondere bei der Einarbeitung in den TH-gekoppelten Simulator TOUGH2 sowie bei der Beschaffung von Bohrkernmaterial und bei der Durchführung von in situ-Untersuchungen. Zu danken ist insbesondere Herrn Prof. Dr. J. Rutqvist, Herrn Dr. S. Finsterle und Frau Dr. L. Blanco Martín vom US-amerikanischen Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL) für die zahlreichen Hilfestellungen und die Gewährung vertiefter Einblicke in das Programm TOUGH2 und seine Strukturen und Funktionalitäten im Rahmen eines wissenschaftlichen Erfahrungsaustausches sowie für die daraus erwachsene fruchtbare Kooperation, die bis heute andauert und hoffentlich auch in Zukunft in dieser erfolgreichen Form fortgesetzt werden kann.

Des Weiteren gilt ein Dank auch an die Herren Dr. O. Czaikowski, K. Wieczorek und M. Komischke von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) Braunschweig für die Möglichkeit zur Durchführung der in situ-Arbeiten im URL Mont Terri, für ihre freundliche Unterstützung bei der Bohrkernmaterialbeschaffung sowie für die Kooperation hinsichtlich der Validierung des FTK-Simulators.

Darüber hinaus ist ein Dank auszusprechen an die Herren Dr. P. Bossart, Dr. C. Nussbaum, Dr. D. Jaeggi und T. Theurillat vom schweizerischen Bundesamt für Landestopografie (swisstopo) sowie an die Herren Dr. J.-D. Barnichon, Dr. J. Cabrera und P. Desveaux vom französischen Institut für Strahlenschutz und Nukleare Sicherheit (IRSN) für ihre stetige Bereitschaft zur Zusammenarbeit und ihre Mithilfe bei der Durchführung von Kaliberbohrlochmessungen und Videokamerabefahrungen in den Untertagelaboren Mont Terri und Tournemire.

Ein ebensolcher Dank gilt dem Projektträger Karlsruhe – Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE) mit den Herren Dipl.-Ing. M. Bühler, Dr. H. Pitterich und Dr. W. Steininger für die jederzeitige hilfreiche Unterstützung bei der gelegentlich erforderlichen Überwindung von insbesondere organisatorischen und administrativen Hürden und das stetige Interesse am Fortgang der Arbeiten sowie ausdrücklich dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) für die grundsätzliche finanzielle Förderung dieses Forschungsvorhabens.





11 Literaturverzeichnis

- Alonso, E.E.; Alcoverro, J.; Coste, F.; Malinsky, L.; Merrien-Soukatchoff, V.; Kadiri, I.; Nowak, T.; Shao, H.; Nguyen, T.S.; Selvadurai, A.P.S.; Armand, G.; Sobolik, S.R.; Itamura, M.; Stone, C.M.; Webb, S.W.; Rejeb, A.; Tijani, M.; Maouche, Z.; Kobayashi, A.; Kurikami, H.; Ito, A.; Sugita, Y.; Chijimatsu, M.; Börgesson, L.; Hernelind, J.; Rutqvist, J.; Tsang, C.-F.; Jussila, P. (2005):* The FEBEX benchmark test: case definition and comparison of modelling approaches. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, Band 42(5-6), Seiten 611-638, Elsevier.
- Asahina, D.; Houseworth, J.E.; Birkholzer, J.T.; Rutqvist, J.; Bolander, J.E. (2014):* Hydro-mechanical model for wetting/drying and fracture development in geomaterials. *Computers & Geosciences*, Band 65 (Tagungsband des 4. TOUGH-Symposiums, 17.-19. September 2012, Berkeley, Kalifornien, USA), Seiten 13-23, Elsevier.
- Bechthold, W.; Rothfuchs, T.; Poley, A.; Ghoreychi, M.; Heusermann, S.; Gens, A.; Olivella, S. (1999):* Backfilling and Sealing of Underground Repositories for Radioactive Waste in Salt (BAMBUS project). Abschlussbericht *EUR 19124 EN* zum Projekt „BAMBUS“, EU-Veröffentlichung, Luxemburg, Luxemburg.
- Bechthold, W.; Smailos, E.; Heusermann, S.; Bollingerfehr, W.; Bazargan-Sabet, B.; Rothfuchs, T.; Kamlot, P.; Grupa, J.; Olivella, S.; Hansen, F.D. (2004):* Backfilling and sealing of underground repositories for radioactive waste in salt (Bambus II project). Abschlussbericht *EUR 20621 EN* zum Projekt „BAMBUS II“, EU-Veröffentlichung, Luxemburg, Luxemburg.
- Blanco Martín, L.; Rutqvist, J.; Birkholzer, J.T.; Houseworth, J.E. (2013):* Thermal-Hydraulic-Mechanical Process Modeling to Evaluate Salt-based Repositories in the Long-Term. Online-Tagungsband zum 47. „U.S. Rock Mechanics/Geomechanics Symposium“ der ARMA, 23.-26. Juni 2013, San Francisco, Kalifornien, USA, ARMA 13-621.
- Blanco Martín, L.; Rutqvist, J.; Birkholzer, J.T.; Wolters, R.; Rutenberg, M.; Zhao, J.; Lux, K.-H. (2014):* Comparison of two modeling procedures to evaluate thermal-hydraulic-mechanical processes in a generic salt repository for high-level nuclear waste. Online-Tagungsband zum 48. „U.S. Rock Mechanics/Geomechanics Symposium“ der ARMA, 1.-4. Juni 2014, Minneapolis, Minnesota, USA, ARMA 14-7411.



- Blümling, P.; Bernier, F.; Lebon, P.; Martin, C.D. (2007):* The excavation damaged zone in clay formations – time-dependent behaviour and influence on performance assessment. Physics and Chemistry of the Earth, Band 32(8-14) (Tagungsband der 2. internationalen ANDRA-Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“, 14.-18. März 2005, Tours, Frankreich), Seiten 588-599, Elsevier.
- Bock, H. (2001):* RA Experiment – Rock Mechanics Analyses and Synthesis: Data Report on Rock Mechanics. TR 2000-02. Technischer Bericht des Mont Terri Project, Schweiz.
- Bock, H. (2009):* RA Experiment: Updated Review of the Rock Mechanics Properties of the Opalinus Clay of the Mont Terri URL based on Laboratory and Field Testing. TR 2008-04. Technischer Bericht des Mont Terri Project, Bern, Schweiz.
- Bollingerfehr, W.; Buhmann, D.; Filbert, W.; Keller, S.; Krone, J.; Lommerzheim, A.; Mönig, J.; Mrugalla, S.; Müller-Hoeppe, N.; Weber, J.R.; Wolf, Jens (2013):* Status of the safety concept and safety demonstration for an HLW repository in salt. TEC-15-2013-AB. Zusammenfassender Bericht zu den BMWi-Forschungsvorhaben „KOMTESSA“ mit den Förderkennzeichen 02E10719 und 02E10729, GRS/BGR/DBETEC, Peine.
- Bossart, P.; Thury, M. (2008):* Mont Terri Rock Laboratory – Project, Programme 1996 to 2007 and Results. Berichte der Landesgeologie (Swiss Geological Survey), Nr. 3, Wabern, Schweiz.
- Breustedt, M.; te Kamp, L.; Möller, S.C.; Hahn, P. (2012):* Numerische Prognose zum Gebirgsverhalten und Ausbaubelastung bei der Errichtung Endlager Konrad. Tagungsband zum 41. Geomechanik-Kolloquium, 16. November 2012, Freiberg, S. 153-173, Veröffentlichungen des Institutes für Geotechnik der TU Bergakademie Freiberg.
- Brooks, R.H.; Corey, A.T. (1964):* Hydraulic properties of porous media. Hydrology Papers, Nr. 3, Colorado State University, Fort Collins, Colorado, USA.
- Burdine, N.T. (1953):* Relative permeability calculations from pore size distribution data. Petroleum Transactions, Band 198, Seiten 71-78, American Institute of Mining, Metallurgical, and Petroleum Engineers (AIME), Dallas, Texas, USA.
- Cabrera, J. (2009):* The Tournemire Experimental Platform. Vortrag im Rahmen des von der IAEQ in Zusammenarbeit mit dem IRSN organisierten Kurses „Regional Training Course on Underground Testing in Hard Clays as Geological Formation for Radioactive Waste



Disposal – Highlights from IRSN Safety Research Performed at Tournemire to Support Regulatory Review“, 15.-19. Juni 2009, Tournemire, Frankreich.

Cabrera, J.; Volant, P.; Baker, C.; Pettitt, W.; Young, R.P. (1999): Structural and geophysical investigations of the EDZ (Excavation Disturbed Zone) in indurated argillaceous media: The tunnel and the galleries of the IPSN Tournemire site, France. Rock Mechanics for Industry (Tagungsband zum 37. „U.S. Rock Mechanics Symposium“ der ARMA, 7.-9. Juni 1999, Vail, Colorado, USA), Seiten 957-964, A A Balkema Publishers.

COMSOL Inc. (2011): COMSOL Multiphysics 4.2, User’s Guide. Offizielles Software-Benutzerhandbuch.

Corey, A.T. (1954): The Interrelation Between Gas and Oil Relative Permeabilities. Producers Monthly, Band 19(1), Seiten 38-41, Bradford District Pennsylvania Oil Producers Association, Bradford, Pennsylvania, USA.

Corkum, A.G. (2006): Non-Linear Behaviour of Opalinus Clay Around Underground Excavations. Department of Civil and Environmental Engineering, University of Alberta, Edmonton, Alberta, Kanada. Ph.D.-Schrift.

Cosenza, P.; Ghoreychi, M. (1994): Thermo-hydro-chemico-mechanical processes in salt – Application to the measurement of permeability to gas and brine. Nuclear science and technology (Tagungsband *EUR 15734 EN* der Europäischen Kommission zur internationalen PEGASUS-Konferenz, 3.-4. Juni 1993, Köln), Seiten 149-170, EU-Veröffentlichung.

Czaikowski, O. (2011): Laborative und rechnerische Untersuchungen zu geomechanisch-geohydraulischen Wechselwirkungen im Tongestein im Hinblick auf die Endlagerung radioaktiver Abfälle. Heft Nr. 17 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld. Dissertation.

Czaikowski, O.; Komischke, M.; Lux, K.-H.; Rutenberg, M.; Seeska, R.; Wieczorek, K. (2015): Comparative modelling and simulation of selected in-situ measurements performed at URL Mont Terri using FLAC-TOUGH and CODE_BRIGHT. Posterpräsentation auf der 6. internationalen Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“, ONDRAF/NIRAS, 23.-26. März 2015, Brüssel, Belgien.

Czaikowski, O.; Komischke, M.; Wieczorek, K. (2014): Interpretative modelling of selected in situ measurements obtained at URL Mont Terri using CODE_BRIGHT. 6th Workshop of CODE_BRIGHT Users, UPC/CIMNE, 13. Mai 2014, Barcelona, Spanien.



- Czaikowski, O.; Lux, K.-H. (2006):* Physical modelling and numerical simulation of long-term deformation behaviour of indurated clay with special consideration of anisotropic effects and in situ measurements. Tagungsband des regionalen ISRM-Symposiums „Eurock 2006 – Multiphysics Coupling and Long Term Behaviour in Rock Mechanics“, 9.-12. Mai 2006, Lüttich, Belgien, Seiten 487-492, Taylor & Francis.
- Czaikowski, O.; Lux, K.-H. (2008):* New method for ageing resistant storage of argillaceous rock samples to achieve reproducible experimental results even after long intermediate storage times. Physics and Chemistry of the Earth, Band 33(S1) (Tagungsband der 3. internationalen ANDRA-Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“, 17.-20. September 2007, Lille, Frankreich), Seiten S444-S447, Elsevier.
- Czaikowski, O.; Wieczorek, K. (2013):* Identification of potential driving mechanisms for HM coupled time-dependent deformation of argillaceous rocks. Physics and Chemistry of the Earth, Band 65, Seiten 11-19, Elsevier.
- Dean, J.A. (ed.) (1985):* Lange’s handbook of chemistry. 13. Edition, McGraw-Hill, New York (Stadt & Bundesstaat), USA.
- Dessirier, B.; Jarsjö, J.; Frampton, A. (2012):* Multiphase Flow and Interaction Dynamics between Bentonite Clay and Fractured Crystalline Rock. Online-Tagungsband des 4. TOUGH-Symposiums, 17.-19. September 2012, Berkeley, Kalifornien, USA, Seiten 358-364.
- Do, N.-A.; Dias, D.; Oreste, P. (2015):* 3D numerical investigation on the interaction between mechanized twin tunnels in soft ground. Environmental Earth Sciences, Band 73(5), Seiten 2101-2113, Springer-Verlag.
- Düsterloh, U. (2009):* Geotechnische Sicherheitsnachweise für Hohlrumbauten im Salinargebirge unter besonderer Berücksichtigung laborativer Untersuchungen. Heft Nr. 16 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld. Habilitationsschrift.
- Düsterloh, U.; Lux, K.-H. (2003):* Geologische und geotechnische Barrieren – Gedanken zur Nachweisführung. Clausthaler Kolloquium zur Endlagerung 2003, 8.-9. Mai 2003, Heft Nr. 14 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld, Seiten 89-120.



- Eberth, S. (2008):* Modellansätze zum Verheilungsverhalten von Steinsalz und ihre Anwendung auf Querschnittabdichtungen im Salinargebirge. Heft Nr. 15 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld. Dissertation.
- Emmert, M. (1996):* Physikalische Beschreibung und numerische Modellierung von nichtisothermen Mehrphasen/Mehrkomponentenprozessen in heterogenen porösen Medien. Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart. Dissertation.
- Faust, B.; Krüger, R.; Lucke, A.; Tertel, S. (2011):* JIFE – Java Application for Interactive Nonlinear Finite-Element Analysis in Multi-Physics. Offizielles Software-Benutzerhandbuch.
- Finsterle, S. (2013):* iTOUGH2 Command Reference. *LBLN-40041*. Befehlsübersicht zum offiziellen Software-Benutzerhandbuch, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, Kalifornien, USA. (überarbeitete Version)
- García-Siñeriz Martínez, J.L.; Bárcena Barrigón, I.; Abós, H. (2015):* Operational Aspects of the heating systems. Präsentation auf dem 33. Technical Meeting des Mont Terri Project, 11.-12. Februar 2015, Pruntrut (Porrentruy), Schweiz.
- Gaus, I.; Garitte, B.; Senger, R.; Gens, A.; Vasconcelos, R.; García-Siñeriz Martínez, J.L.; Trick, T.; Wieczorek, K.; Czaikowski, O.; Schuster, K.; Mayor, J.C.; Velasco, M.; Kuhlmann, U.; Villar, M.V. (2014):* The HE-E Experiment: Lay-out, Interpretation and THM Modelling. *NAB 14-53*. Arbeitsbericht der Nationalen Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (Nagra) zum EU-Projekt „PEBS“, Wettingen, Schweiz.
- Grant, M.A. (1977):* Permeability reduction factors at Wairakei. *77-HT-52*. Veröffentlichungen der ASME/AIChE-„Heat Transfer Conference“, Salt Lake City, Utah, USA.
- Graupner, B.J.; Lee, C.; Maekawa, K.; Manepally, C.; Pan, P.; Rutqvist, J.; Wang, W.; Garritte, B. (2013):* The Mont Terri HE-D Experiment as a Benchmark for the Simulation of Coupled THM Processes. Tagungsband des 1. internationalen EAGE-Workshops „The Ground as Energy Source and Storage“, 26.-28. November 2013, Lausanne, Schweiz, 103375.
- Hampel, A.; Günther, R.-M.; Salzer, K.; Minkley, W.; Pudewills, A.; Leuger, B.; Zapf, D.; Rokahr, R.; Herchen, K.; Wolters, R.; Düsterloh, U. (2010):* Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen



Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz. Synthesebericht zum BMBF-Forschungsvorhaben mit den Förderkennzeichen 02C1577 bis 02C1617.

Hanl, A. (2013): Numerische Simulation des hydraulischen 1-Phasen-Flusses in porösen Medien bei hydraulisch-mechanisch gekoppelter Betrachtungsweise. Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld. Masterarbeit.

Helmig, R.; Braun, C.; Emmert, M. (1994): MUFTE: A Numerical Model for Simulation of Multiphase Flow Processes in Porous and Fractured-Porous Media. *PD 1994/20, HG 208*. Programmdokumentation des Instituts für Wasserbau, Universität Stuttgart.

Heusermann, S.; Eickemeier, R.; Nipp, H.-K.; Fahland, S. (2013): Three-dimensional thermomechanical modelling of high-level waste emplacement in a salt dome. Rock Characterisation, Modelling and Engineering Design Methods (Tagungsbuch zum 3. ISRM-SINOROCK-Symposium, 18.-20. Juni 2013, Shanghai, China), Seiten 647-652, CRC Press.

Hirschfelder, J.O.; Curtiss, C.F.; Bird, R.B. (1954): Molecular theory of gases and liquids. John Wiley & Sons, New York (Stadt & Bundesstaat), USA.

Hou, Z. (2002): Geomechanische Planungskonzepte für untertägige Tragwerke mit besonderer Berücksichtigung von Gefügeschädigung, Verheilung und hydromechanischer Kopplung. Heft Nr. 13 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld. Habilitationsschrift.

Hou, Z.; Lux, K.-H. (2004): A new coupling concept for the hydro-mechanical interaction of clay stone and rock salt in underground waste repositories. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, Band 41(3) (Tagungsband zum 1. ISRM-SINOROCK-Symposium, 18.-21. Mai 2004, Yichang/Drei-Schluchten-Talsperre, China), Seite 495 (CD-ROM, 6 Seiten), Elsevier.

Hudson, J.A.; Jing, L. (2013): Demonstration of coupled models and their validation against experiment: The current phase DECOVALEX 2015. Rock Characterisation, Modelling and Engineering Design Methods (Tagungsbuch zum 3. ISRM-SINOROCK-Symposium, 18.-20. Juni 2013, Shanghai, China), Seiten 391-396, CRC Press.

Hudson, J.A.; Jing, L.; Hoch, A.; Hokr, M.; Leung, C.; Zimmerman, R.W.; Liu, Q.; Wu, Y.; Rutqvist, J.; Neretnieks, I.; Zhao, Z. (2012): DECOVALEX-2011 Project – Final Report of Task C – Assessment of coupled THMC processes in single fractures and fractured rocks.



- TRITA-LWR.Report 3036*. Abschlussbericht, Königlich Technische Hochschule (KTH), Stockholm, Schweden.
- Hunsche, U.; Cristescu, N.D. (1997)*: Time Effects in Rock Mechanics. John Wiley & Sons.
- IFC (1967)*: The 1967 IFC Formulation for Industrial Use: A Formulation of the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance. Internationaler Formulierungsausschuss (International Formulation Committee) der 6. „International Conference on the Properties of Steam“ vom 7.-10. Oktober 1963 in New York (Stadt & Bundesstaat), USA. IFC Sekretariat, Verein Deutscher Ingenieure, Düsseldorf.
- Inderbitzin, L.; Möri, A.; Nussbaum, C.; Bossart, P. (2004)*: RA Experiment: Structural geological interpretation of the collapsed borehole BED-C3. *TN 2003-33*. Unveröffentlichte Technische Mitteilung des Mont Terri Project, Schweiz.
- Irmay, S. (1954)*: On the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Transactions of the American Geophysical Union, Band 35(3), Seiten 463-467, Washington, D.C., USA.
- Itasca Consulting Group Inc. (2009)*: FLAC^{3D}, Version 4.0, User's Guide. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, Minneapolis, Minnesota, USA.
- Itasca Consulting Group Inc. (2011)*: FLAC, Version 7.0, User's Guide. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, Minneapolis, Minnesota, USA.
- Jobmann, M.; Amelung, P.; Billaux, D.; Polster, M.; Schmidt, H.; Uhlig, L. (2007)*: Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Auslegung eines generischen Endlagers im Tonstein in Deutschland. Abschlussbericht zum BMWA-Forschungsvorhaben „GENESIS“ mit dem Förderkennzeichen 02E9733, DBETEC, Peine. (Haupt- und Anlagenband)
- Johnson, L.H.; Niemeyer, M.; Klubertanz, G.; Siegel, P.; Gribi, P. (2002)*: Calculations of the Temperature Evolution of a Repository for Spent Fuel, Vitrified High-Level Waste and Intermediate Level Waste in Opalinus Clay. *NTB 01-04*. Technischer Bericht der Nationalen Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (Nagra), Wettingen, Schweiz.
- Kim, H.-m.; Rutqvist, J.; Ryu, D.-w.; Choi, B.-h.; Sunwoo, C.; Song, W.-k. (2012)*: Exploring the concept of compressed air energy storage (CAES) in lined rock caverns at shallow depth: A modeling study of air tightness and energy balance. Applied Energy, Band 92, Seiten 653-667, Elsevier.



- Kirsch, E.G. (1898):* Die Theorie der Elastizität und die Bedürfnisse der Festigkeitslehre. Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure, Band 42, Seiten 797-807.
- Kock, I.; Eickemeier, R.; Frieling, G.; Heusermann, S.; Knauth, M.; Minkley, W.; Navarro, M.; Nipp, H.-K.; Vogel, P. (2012):* Integritätsanalyse der geologischen Barriere. GRS-286. Abschlussbericht zum Arbeitspaket 9.1 des BMU-Forschungsvorhabens „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“, BGR/GRS/IfG, Köln.
- Kolditz, O.; Bauer, S.; Bilke, L.; Böttcher, N.; Delfs, J.-O.; Fischer, T.; Görke, U.-J.; Kalbacher, T.; Kosakowski, G.; McDermott, C.I.; Park, C.-h.; Radu, F.; Rink, K.; Shao, Hua; Shao, Haibing; Sun, F.; Sun, Y.; Singh, A.K.; Taron, J.; Walther, M.; Wang, W.; Watanaabe, N.; Wu, Y.; Xie, M.; Xu, W.; Zehner, B. (2012):* OpenGeoSys: an open-source initiative for numerical simulation of thermo-hydro-mechanical/chemical (THM/C) processes in porous media. Environmental Earth Sciences, Band 67(2), Seiten 589-599, Springer-Verlag.
- Krone, J. (2005):* Versuch eines Fazits hinsichtlich der Entwicklung von Endlagerkonzepten im Salz und Ton. Workshop: Gegenüberstellung von Endlagerkonzepten im Salz und Ton-gestein, 19.-20. Januar 2005, DBE, Peine.
- Kühle, T.; Graefe, V.; Hirsekorn, R.-P. (1999):* Zweiphasenfluß-Modellrechnungen zur Berücksichtigung der Gasproduktion in Endlagern und Modellansätze für Langzeitsicherheitsanalysen. GRS-158. Bericht der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH, Braunschweig.
- Kull, H.; Jockwer, N.; Zhang, C.-L.; Wileveau, Y.; Pepa, S. (2007):* Measurement of thermally-induced pore-water pressure increase and gas migration in the Opalinus Clay at Mont Terri. Physics and Chemistry of the Earth, Band 32(8-14) (Tagungsband der 2. internationalen ANDRA-Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“, 14.-18. März 2005, Tours, Frankreich), Seiten 937-946, Elsevier.
- Kunz, H.; Shao, H.; Zaretski, B.; Zhao, H.G.; Su, R.; Wang, J. (2013):* 3D numerical model evaluation of packer tests for hydraulic characterisation of fractured rock. Rock Characterisation, Modelling and Engineering Design Methods (Tagungsbuch zum 3. ISRM-SINO-ROCK-Symposium, 18.-20. Juni 2013, Shanghai, China), Seiten 479-484, CRC Press.
- Kwon, S.; Cho, W.-j.; Han, P.-s. (2006):* Concept development of an underground research tunnel for validating the Korean reference HLW disposal system. Tunnelling and Underground Space Technology, Band 21(2), Seiten 203-217, Elsevier.



- Lerche, S. (2012):* Kriech- und Schädigungsprozesse im Salinargebirge bei mono- und multi-zyklischer Belastung. Heft Nr. 18 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld. Dissertation.
- Lisjak, A.; Garitte, B.; Grasselli, G.; Müller, H.R.; Vietor, T. (2015):* The excavation of a circular tunnel in a bedded argillaceous rock (Opalinus Clay): Short-term rock mass response and FDEM numerical analysis. *Tunnelling and Underground Space Technology*, Band 45, Seiten 227-248, Elsevier.
- Loomis, A.G. (1928):* Solubilities of gases in water. *International critical tables of numerical data, physics, chemistry and technology*, Band 3, Seiten 255-261, McGraw-Hill Book Company, New York (Stadt & Bundesstaat), USA.
- Luckner, L.; van Genuchten, M.T.; Nielsen, D.R. (1989):* A Consistent Set of Parametric Models for the Two-Phase Flow of Immiscible Fluids in the Subsurface. *Water Resources Research*, Band 25(10), Seiten 2187-2193, Wiley-Blackwell.
- Lux, K.-H. et al. (2002a):* Entwicklung und Fundierung der Anforderung „Günstige gebirgsmechanische Voraussetzungen“, Teil A: Grundlegende rechnerische Untersuchungen. Gutachten im Auftrag des AkEnd, Professur für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld.
- Lux, K.-H. et al. (2002b):* Entwicklung und Fundierung der Anforderung „Günstige gebirgsmechanische Voraussetzungen“, Teil B: Weiterführende laborative und rechnerische Untersuchungen. Gutachten im Auftrag des AkEnd, Professur für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld.
- Lux, K.-H.; Czaikowski, O. (2005):* Rock-Mechanical Investigations for Validation of the Hou/Lux-T Constitutive Model Based on Underground Measurements in Argillaceous Rock Mass. Posterpräsentation auf der 2. internationalen ANDRA-Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“, 14.-18. März 2005, Tours, Frankreich.
- Lux, K.-H.; Czaikowski, O.; Rutenberg, M.; Seeska, R.; Düsterloh, U. (2012):* Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E10427, Clausthal-Zellerfeld.



- Lux, K.-H.; Czaikowski, O.; Wolters, R.; Düsterloh, U. (2005a):* Gebirgsmechanische Beurteilung von Tongesteinsformationen im Hinblick auf die Endlagerung radioaktiver Abfälle. *PSP-Element WS-0029*. Abschlussbericht im Auftrag des BfS, Clausthal-Zellerfeld.
- Lux, K.-H.; Czaikowski, O.; Wolters, R.; Düsterloh, U. (2006):* Laborative und numerische Grundlagenuntersuchungen zur Übertragbarkeit von Stoffmodellansätzen und EDV-Software für Endlager im Salzgestein auf Endlager im Tongestein. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E9632, Clausthal-Zellerfeld.
- Lux, K.-H.; Düsterloh, U.; Wolters, R. (2009):* Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckgetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrieren-Gebirge (Salinar). Abschlussbericht zum BMBF-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02C1355, Clausthal-Zellerfeld.
- Lux, K.-H.; Hou, Z.; Düsterloh, U.; Wolters, R. (2005b):* Experimental Studies of Strength and Creep Behaviour as well as New Developments of the Hou/Lux-T Constitutive Model for Claystone. Posterpräsentation auf der 2. internationalen ANDRA-Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“, 14.-18. März 2005, Tours, Frankreich.
- Lux, K.-H.; Seeska, R. (2010):* Möglichkeiten der Datenerhebung von Übertage zur Standortbewertung von Endlagern im Tonsteingebirge. Abschlussbericht zum UFOPLAN-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 3607R02596 im Auftrag des BfS, Clausthal-Zellerfeld.
- Martin, C.D.; Lanyon, G.W. (2003):* Measurement of in-situ stress in weak rocks at Mont Terri Rock Laboratory, Switzerland. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, Band 40(7-8), Seiten 1077-1088, Elsevier.
- Martin, C.D.; Lanyon, G.W.; Bossart, P.; Blümling, P. (2004):* Excavation Disturbed Zone (EDZ) in Clay Shale: Mont Terri. *TR 2001-01*. Technischer Bericht des Mont Terri Project, Schweiz.
- Maßmann, J.; Ziefle, G.; Kohlmeier, M.; Zielke, W. (2011):* Thermo-Hydro-Mechanical Modeling of Coupled Processes in Clay Materials. *Modelling, Simulation and Software Concepts for Scientific-Technological Problems*, aus der Reihe „Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics“, Band 57, Seiten 29-74, Springer-Verlag.



- Mualem, Y. (1976):* A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media. *Water Resources Research*, Band 12(3), Seiten 513-522, Wiley-Blackwell.
- Müller-Hoeppe, N.; Breustedt, M; Wolf, Johanna; Czaikowski, O.; Wieczorek; K. (2012):* Integrität geotechnischer Barrieren – Teil 2: Vertiefte Nachweisführung. *GRS-288*. Abschlussbericht zum Arbeitspaket 9.2 des BMU-Forschungsvorhabens „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“, DBETEC/GRS, Braunschweig.
- Nagra (2001):* Sondierbohrung Benken, Untersuchungsbericht. *NTB 00-01*. Technischer Bericht der Nationalen Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Wettingen, Schweiz. (Text- und Beilagenband)
- Nagra (2008):* Effects of post-disposal gas generation in a repository for low- and intermediate-level waste sited in the Opalinus Clay of Northern Switzerland. *NTB 08-07*. Technischer Bericht der Nagra, Wettingen, Schweiz.
- Najafi, M.; Jalali, S.M.E.; Khalokakaie, R. (2014):* Thermal-mechanical-numerical analysis of stress distribution in the vicinity of underground coal gasification (UCG) panels. *International Journal of Coal Geology*, Band 134/135, Seiten 1-16, Elsevier.
- Navarro, M. (2013):* Handbuch zum Code TOUGH2-GRS.00a – Erweiterungen des Codes TOUGH2 zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Endlagern. *GRS-310*. Bericht zum BMU-Forschungsvorhaben 3609R03210, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, Köln.
- Navarro, M.; Seher, H. (2011):* Nicht-kartesische Gitter für TOUGH2. *GRS-A-3593*, revidierte Fassung. Bericht der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH, Köln.
- Neubert, N. (2014):* Stability and integrity of geotechnical barriers under earthquake loading. Tagungsband zum 43. Geomechanik-Kolloquium, 14. November 2014, Freiberg, S. 227-239, Veröffentlichungen des Institutes für Geotechnik der TU Bergakademie Freiberg.
- Niandou, H.; Shao, J.F.; Henry, J.P.; Fourmaintraux, D. (1997):* Laboratory Investigation of the Mechanical Behaviour of Tournemire Shale. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, Band 34(1), Seiten 3-16, Elsevier.
- Parker, J.C.; Lenhard, R.J.; Kuppusamy, T. (1987):* A Parametric Model for Constitutive Properties Governing Multiphase Flow in Porous Media. *Water Resources Research*, Band 23(4), Seiten 618-624, Wiley-Blackwell.



- Pearson, S.C.P.; Alcaraz, S.A.; Barber, J. (2014):* Numerical simulations to assess thermal potential at Tauranga low-temperature geothermal system, New Zealand. *Hydrogeology Journal*, Band 22(1), Seiten 163-174, Springer-Verlag.
- Pruess, K. (1987):* TOUGH User's Guide. *LBL-20700*. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, Kalifornien, USA.
- Pruess, K. (2004):* The TOUGH Codes—A Family of Simulation Tools for Multiphase Flow and Transport Processes in Permeable Media. *Vadose Zone Journal*, Band 3(3), Seiten 738-746, Soil Science Society of America, Madison, Wisconsin, USA.
- Pruess, K.; Oldenburg, C.; Moridis, G. (1999/2012):* TOUGH2 User's Guide, Version 2. *LBNL-43134*. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, Kalifornien, USA. (Versionen: 1999 Original, 2012 überarbeitet)
- Rejeb, A. (2003):* Time-dependent behaviour of Tournemire argillites (France). Tagungsband des 10. internationalen ISRM-Felsmechanik-Kongresses „Technology roadmap for Rock Mechanics“, 8.-12. September 2003, Gauteng, Südafrika, Seiten 955-960.
- Rejeb, A.; Rouabhi, A.; Millard, A.; Maßmann, J.; Uehara, S. (2008):* DECOVALEX-THMC Project – Task C – Hydro-mechanical response of the Tournemire argillite to the underground openings excavation: unsaturated zones and mine-by-test experiment. *2008:44*. Abschlussbericht, Staatliches Kernkraftinspektorat (SKI), Stockholm, Schweden.
- Rübel, A.; Mönig, J. (2010):* Projekt VerSi: Endlagerung im Tongestein – Entwicklung eines synthetischen Tonsteinstandortes, Teil 4: Modellkonzept für ein Endlager im Salz. *GRS-A-3535/4*. Abschlussbericht zum Teil 4 des BMU-Forschungsvorhabens mit dem Förderkennzeichen 3607R02538, Braunschweig.
- Rutenberg, M.; Czaikowski, O.; Lux, K.-H. (2012):* Time-Dependent Deformation of Claystone Rock Mass—Numerical Simulation and Field Measurement Data. Tagungsband *EUR 25527 EN* der Europäischen Kommission zur internationalen TIMODAZ/THERESA-Konferenz „Impact of Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical (THMC) processes on the safety of underground radioactive waste repositories“, 29. September-1. Oktober 2009, Luxemburg, Luxemburg, S. 459-463, EU-Veröffentlichung.
- Rutenberg, M.; Lux, K.-H. (2011):* Numerical simulation of the time-dependent deformation behaviour of claystone rock mass at the Tournemire site with 2D and 3D models. *Physics and Chemistry of the Earth*, Band 36(17-18) (Tagungsband der 4. internationalen ANDRA-



Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“, 29. März-1. April 2010, Nantes, Frankreich), Seiten 1913-1921, Elsevier.

Rutqvist, J. (2011): Status of the TOUGH-FLAC simulator and recent applications related to coupled fluid flow and crustal deformations. *Computers & Geosciences*, Band 37(6) (Tagungsband des 3. TOUGH-Symposiums, 14.-16. September 2009, Berkeley, Kalifornien, USA), Seiten 739-750, Elsevier.

Rutqvist, J.; Ijiri, Y.; Yamamoto, H. (2011): Implementation of the Barcelona Basic Model into TOUGH-FLAC for simulations of the geomechanical behavior of unsaturated soils. *Computers & Geosciences*, Band 37(6) (Tagungsband des 3. TOUGH-Symposiums, 14.-16. September 2009, Berkeley, Kalifornien, USA), Seiten 751-762, Elsevier.

Rutqvist, J.; Kim, H.-m.; Ryu, D.-w.; Synn, J.-h.; Song, W.-k. (2012): Modeling of coupled thermodynamic and geomechanical performance of underground compressed air energy storage in lined rock caverns. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, Band 52, Seiten 71-81, Elsevier.

Rutqvist, J.; Moridis, G. (2008): Development of a Numerical Simulator for Analyzing the Geomechanical Performance of Hydrate-Bearing Sediments. Tagungsband zum 42. „U.S. Rock Mechanics Symposium“ der ARMA, 29. Juni-2. Juli 2008, San Francisco, Kalifornien, USA, Paper 139.

Rutqvist, J.; Tsang, C.-F. (2003): TOUGH-FLAC: A numerical simulator for analysis of coupled thermal-hydrologic-mechanical processes in fractured and porous geological media under multi-phase flow conditions. Online-Veröffentlichungen zum 1. TOUGH-Symposium, 12.-14. Mai 2003, Berkeley, Kalifornien, USA.

Rutqvist, J.; Vasco, D.W.; Myer, L. (2009): Coupled reservoir-geomechanical analysis of CO₂ injection at In Salah, Algeria. *Energy Procedia*, Band 1 (Tagungsband der 9. Konferenz „Greenhouse Gas Control Technologies“, 16.-20. November 2008, Washington D.C., USA), Seiten 1847-1854, Elsevier.

Rutqvist, J.; Wu, Y.-S.; Tsang, C.-F.; Bodvarsson, G. (2002): A modeling approach for analysis of coupled multiphase fluid flow, heat transfer, and deformation in fractured porous rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, Band 39(4), Seiten 429-442, Elsevier.



- Rycroft, C.H. (2009):* VORO++: A three-dimensional Voronoi cell library in C++. *041111*. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, Band 19(4), American Institute of Physics Publishing, Melville, New York, USA.
- Sainoki, A.; Mitri, H.S. (2014):* Dynamic modelling of fault-slip with Barton's shear strength model. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, Band 67, Seiten 155-163, Elsevier.
- Schmidt, H.-H. (2001):* Grundlagen der Geotechnik. 2. Auflage, B.G. Teubner Verlag, Wiesbaden.
- Schulze, O.; Hunsche, U. (2005):* Dilatanz und Permeabilität im Steinsalz und Tonstein. Workshop: Gegenüberstellung von Endlagerkonzepten im Salz und Tongestein, 19.-20. Januar 2005, DBE, Peine.
- Senent, S.; Jimenez, R.; Reyes, A. (2013):* Numerical simulation of the influence of small-scale defects on the true-triaxial strength of rock samples. *Computers and Geotechnics*, Band 53, Seiten 142-156, Elsevier.
- Sentis, M.L.; Leuz, A.-K. (2012):* Sachplan geologische Tiefenlager, Etappe 1: Gasproduktion, Gastransport und deren Folgen für das SMA-Lager. *ENSI 33/56*. Technische Beurteilung des Eidgenössischen Nuklearsicherheitsinspektorates, Brugg, Schweiz.
- Shao, H.; Sönnke, J.; Morel, J.; Krug, S. (2011):* In situ determination of anisotropic permeability in clay. *Physics and Chemistry of the Earth*, Band 36(17-18) (Tagungsband der 4. internationalen ANDRA-Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“, 29. März-1. April 2010, Nantes, Frankreich), Seiten 1688-1692, Elsevier.
- Souley, M.; Armand, G.; Su, K.; Ghoreychi, M. (2011):* Modeling the viscoplastic and damage behavior in deep argillaceous rocks. *Physics and Chemistry of the Earth*, Band 36(17-18) (Tagungsband der 4. internationalen ANDRA-Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“, 29. März-1. April 2010, Nantes, Frankreich), Seiten 1949-1959, Elsevier.
- Sun, D.-m.; Semprich, S. (2013):* Using Compressed Air Injection to Control Seawater Intrusion in a Confined Coastal Aquifer. *Transport in Porous Media*, Band 100(2), Seiten 259-278, Springer Science+Business Media.



- Sun, Zhixue; Xu, Y.; Yao, J.; Sun, Zhilei; Liu, J. (2014):* Numerical simulation of produced water reinjection technology for water-soluble gas recovery. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, Band 21, Seiten 700-711, Elsevier.
- Tillner, E.; Kempka, T.; Nakaten, B.; Kühn, M. (2013):* Brine migration through fault zones: 3D numerical simulations for a prospective CO₂ storage site in Northeast Germany. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Band 19, Seiten 689-703, Elsevier.
- Tsang, C.-F.; Bernier, F.; Davies, C. (2005):* Geohydromechanical processes in the Excavation Damaged Zone in crystalline rock, rock salt, and indurated and plastic clays—in the context of radioactive waste disposal. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, Band 42(1), Seiten 109-125, Elsevier.
- Tsang, C.-F.; Stephansson, O.; Jing, L.; Kautsky, F. (2009):* DECOVALEX Project: from 1992 to 2007. *Environmental Geology*, Band 57(6), Seiten 1221-1237, Springer-Verlag.
- UPC (1994/2014):* CODE_BRIGHT User's Guide. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, Polytechnische Universität Katalonien (Universitat Politècnica de Catalunya), Barcelona, Spanien. (Versionen: 1994 Original, 2014 überarbeitet für Version 4.4)
- Valès, F.; Bergues, J.; Nguyen Minh, D.; Gharbi, H.; Rejeb, A. (2002):* Experimental study of the influence of the degree of saturation on physical and mechanical properties in Tournemire argilite (France). Tagungsband des 5. nordamerikanischen Felsmechanik-Symposiums und der 17. Konferenz der Tunnelling Association of Canada (NARMS-TAC 2002), „Mining and Tunnelling Innovation and Opportunity“, 7.-10. Juli 2002, Toronto, Kanada, Seiten 1399-1406.
- van Genuchten, M.T. (1980):* A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Science Society of America Journal*, Band 44(5), Seiten 892-898, Madison, Wisconsin, USA.
- Vargaftik, N.B. (1975):* Tables on the thermophysical properties of liquids and gases. 2. Edition, John Wiley & Sons, New York (Stadt & Bundesstaat), USA.
- Wallner, M. (2003):* Ergebnisse aus 25 Jahren Forschung der BGR zum Steinsalz. Clausthaler Kolloquium zur Endlagerung 2003, 8.-9. Mai 2003, Heft Nr. 14 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld, Seiten 74-88.



- Wang, T.; Yang, C.; Yan, X.; Li, Y.; Liu, W.; Liang, C.; Li, J. (2014):* Dynamic response of underground gas storage salt cavern under seismic loads. *Tunnelling and Underground Space Technology*, Band 43, Seiten 241-252, Elsevier.
- Wassing, B.B.T.; van Wees, J.D.; Fokker, P.A. (2014):* Coupled continuum modeling of fracture reactivation and induced seismicity during enhanced geothermal operations. *Geothermics*, Band 52, Seiten 153-164, Elsevier.
- Werunsky, F.; Hou, Z.; Moog, H.C. (2007):* Coupled Modelling of the C:HM behaviour of self healing salt based backfill. Tagungsband der 6. internationalen Konferenz „SaltMech6 – The Mechanical Behavior of Salt – Understanding of THMC Processes in Salt“, 22.-25. Mai 2007, Hannover, Seiten 269-276.
- Wileveau, Y. (2005):* THM behaviour of host rock: (HE-D experiment): Progress Report September 2003-October 2004, Part 1. *TR 2005-03*. Technischer Bericht des Mont Terri Project, Schweiz.
- Wittke, W. (1984):* Felsmechanik – Grundlagen für wirtschaftliches Bauen im Fels. Springer-Verlag.
- Wolf, Johanna; Jobmann, M.; Polster, M. (2012):* Design Calculations on Temperature, Deformation and Pore Pressure Development due to Heating prior to the Twin Hole Disposal Configuration Test TWIST. Tagungsband *EUR 25527 EN* der Europäischen Kommission zur internationalen TIMODAZ/THERESA-Konferenz „Impact of Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical (THMC) processes on the safety of underground radioactive waste repositories“, 29. September-1. Oktober 2009, Luxemburg, Luxemburg, S. 415-420, EU-Veröffentlichung.
- Wolters, R. (2014):* Thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelte Analysen zum Tragverhalten von Kavernen im Salinargebirge vor dem Hintergrund der Energieträgerspeicherung und der Abfallentsorgung. Heft Nr. 20 der Schriftenreihe des Lehrstuhls für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld. Dissertation.
- Zhang, C.-L.; Czaikowski, O.; Komischke, M.; Wieczorek, K. (2014):* Thermo-Hydro-Mechanical Processes in the Nearfield around a HLW Repository in Argillaceous Formations – Volume II: In-situ-Investigations and Interpretative Modelling. *GRS-313*. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E10377, Braunschweig.



Zhang, C.-L.; Dittrich, J.; Müller, J.; Rothfuchs, T. (2002): Experimental Study of the Hydro-mechanical Behaviour of the Callovo-Oxfordian Argillites. *GRS-187*. Bericht zum BMWi-Forschungsvorhaben mit dem Förderkennzeichen 02E9420, Braunschweig.

Zhang, C.-L.; Rothfuchs, T.; Moog, H.C.; Dittrich, J.; Müller, J. (2004): Thermo-Hydro-Mechanical and Geochemical Behaviour of the Callovo-Oxfordian Argillite and the Opalinus Clay. *GRS-202*. Abschlussbericht zum BMWi-Forschungsvorhaben 02E9541, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, Braunschweig.

Zhang, K.; Wu, Y.-S.; Pruess, K. (2008): User's Guide for TOUGH2-MP—A Massively Parallel Version of the TOUGH2 Code. *LBL-315E*. Offizielles Software-Benutzerhandbuch, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, Kalifornien, USA.

