

Diskontinuumsmechanische Modellierung von Salzgesteinen

Von der Fakultät für Geowissenschaften, Geotechnik und Bergbau
der Technischen Universität Freiberg
genehmigte

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften
(Dr.-Ing.)

vorgelegt von Dipl. Phys. Markus Knauth

geboren am 28.09.1984 in Leipzig

Gutachter:

Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Konietzky, TU Bergakademie Freiberg
Dr.-Ing. habil. Wolfgang Minkley, Institut für Gebirgsmechanik GmbH
Prof. Dr. Peter Moser, Montanuniversität Leoben

Tag der Verleihung: 04.12.2018

Eidesstattliche Versicherung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht.

Weitere Personen waren an der Abfassung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Die Hilfe eines Promotionsberaters habe ich nicht in Anspruch genommen. Weitere Personen haben von mir keine geldwerten Leistungen für Arbeiten erhalten, die nicht als solche kenntlich gemacht worden sind. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Markus Knauth

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Salzgestein als Diskontinuum	5
2.1	Verformungscharakteristik von Salzgesteinen	5
2.2	Mikroskopische Grundlagen	10
2.3	Fluidperkolation und Einschlussvermögen	17
2.4	Verheilung	18
3	Merkmale und Grenzen der kontinuumsmechanischen Modellierung	21
3.1	Finite-Difference-Methode	23
3.2	Grenzen der Kontinuumsmechanik	26
4	Diskontinuumsmechanische Modellierung	29
4.1	Grundidee und Berechnungsablauf der Distinct-Element Methode	29
4.2	Stoffmodelle für inter- und intrakristalline Wechselwirkungen	32
4.2.1	Elasto-visko-plastisches Stoffmodell	32
4.2.2	Adhäsives Scherreibungsmodell für Kontaktflächen	34
4.3	Voronoi-Triangulation	38
4.3.1	Mathematische Grundlagen	38
4.3.2	Voronoi-Diskretisierung beliebiger Modellgeometrien	39
4.3.3	Strukturanalyse von zwei- und dreidimensionalen Voronoi-Zerlegungen	45
5	Entwicklung einer konsistenten Parametrisierungsstrategie	49
5.1	Intra- und interkristalline Wechselwirkungen	49
5.2	Ermittlung elastischer Parameter basierend auf Schallmessungen	54
5.3	Strategie zur Ermittlung der Festigkeitsparameter	58

5.4	Mikroskopische und makroskopische Zugfestigkeit	62
6	Hydro-mechanische Beanspruchung und Perkolation	67
6.1	Darcy-Strömung und Perkolationstheorie	68
6.2	Gas- und Fluidausbreitung im Einzelschichtmodell	73
6.3	Druckgetriebene Öffnung von Fließwegen	77
7	Validierung	85
7.1	Einaxiale Druckversuche an zylindrischen Prüfkörpern	85
7.1.1	Coarse-Graining-Vorstudie	85
7.1.2	Modellaufbau, Randbedingungen und Berechnungsvarianten . . .	88
7.1.3	Berechnungsergebnisse	90
7.2	Triaxiale Druckversuche an zylindrischen Prüfkörpern	94
7.2.1	Modellaufbau, Zielstellung und Volumenmessung	94
7.2.2	Ergebnisse	95
7.2.3	Einsetzen intrakristalliner Schädigung im Nachbruchbereich . . .	99
7.3	Pfeilermodelle	105
7.3.1	Modellaufbau, Randbedingungen und Berechnungsvarianten . . .	105
7.3.2	Ergebnisse	107
7.4	Verheilung	109
7.5	Hydro-mechanisch gekoppelte Berechnungen	115
7.5.1	Extensionsversuche unter Fluidruckbelastung	115
7.5.2	Abhängigkeit der Ausbreitungsrichtung vom Spannungsfeld . . .	117
7.5.3	Winkelabhängigkeit der Rissöffnung an Konturbereichen	118
8	Praktische Anwendungen	123
8.1	Standfestigkeit im Kammer-Pfeiler-Abbau	123
8.1.1	Aufgabenstellung	123
8.1.2	Scheibenmodell Schnitt 1	124
8.1.3	Scheibenmodell Schnitt 2	129
8.1.4	Dynamische Berechnungen	132
8.1.5	Zusammenfassung	137
8.2	Hydro-mechanische Kopplung	139

8.2.1	Grundlegende gebirgsmechanische Vorgänge bei der Gasspeicherung in Salzkavernen	140
8.2.2	Modellaufbau	143
8.2.3	Berechnungsvarianten und Betriebszyklen	144
8.2.4	Berechnungsergebnisse	145
8.2.5	Zusammenfassung	149
8.3	Thermo-hydro-mechanische Kopplung	150
8.3.1	Einführung und grundlegende Aufgabenstellung	150
8.3.2	Modellaufbau einer idealisierten flachen Lagerung	150
8.3.3	Wärmeentwicklung und Versatzmodell	152
8.3.4	Ergebnisse der thermo-hydro-mechanisch gekoppelten Berechnungen	154
8.3.5	Zusammenfassung	158
9	Optimierungsperspektiven und weitere Entwicklung	159
9.1	Einschränkungen in 3DEC & UDEC	159
9.2	Alternative Methoden	160
9.2.1	FEM/DEM	160
9.2.2	Adaptive Vernetzung	162
9.2.3	Erweiterte Finite Elemente (XFEM)	165
10	Zusammenfassung	169
11	Extended Summary	171
	Symbolverzeichnis	183
	Literaturverzeichnis	187
	Abbildungsverzeichnis	195
	Tabellenverzeichnis	204
Anhang A	Validierung - weitere Abbildungen und Daten	205
Anhang B	Anwendungen - Modellparameter und ergänzende Abbildungen	215

Kapitel 1

Einleitung

Die Geschichte des Kalibergbaus in Deutschland begann vor über 170 Jahren mit einer Bohrung in Staßfurt, die im Jahre 1843 das in 250 m Tiefe liegende Kalilager – das spätere „Flöz Staßfurt“ – erreichte [1].

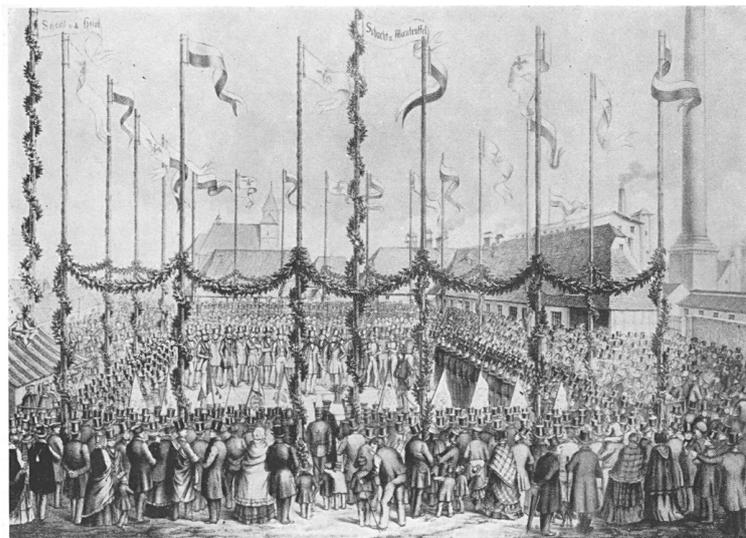


Abb. 1.1: Eröffnung des Staßfurter Salzbergbaus im Jahre 1852. [2]

Trotz anfänglicher Enttäuschung, da der eigentlich anvisierte Steinsalzhorizont nicht erreicht wurde, sind bald industrielle Anwendungszwecke für das stattdessen angetroffene „Bittersalz“ entdeckt worden, die dessen Abbau auch wirtschaftlich lukrativ machten. Somit legte diese Bohrung den Grundstein für das Abteufen der weltweit ersten Kalischächte „von der Heydt“ und „von Manteuffel“ (Abb. 1.1) und läutete das Zeitalter der bergmännischen Gewinnung von Kalisalz ein, als mit beiden Schächten neben dem Kaliflöz auch das ältere

Steinsalz erschlossen wurde. Seither sind in der durchaus bewegten Geschichte des Kali- und Steinsalzbergbaus allein in Deutschland 239 Kalischächte abgeteuft worden [1, 3].

Neben der traditionellen bergmännischen Gewinnung wurden die Salzlagerstätten aufgrund ihrer hydraulischen Dichtheit und Fähigkeit zur langfristigen Speicherung von Gasen und Flüssigkeiten für weitergehende Anwendungen interessant. So wurden weltweit Kavernen ausgesolt, die u.a. zur Speicherung von Erdöl und -gas eingesetzt werden [4]. Weiterhin wird die mögliche Nutzung des Isolationsvermögens der Salzgesteine im Rahmen der langfristigen und sicheren Endlagerung radioaktiver Abfallstoffe seit mehreren Jahrzehnten erforscht und wurde für schwach radioaktive, nicht-wärmeentwickelnde Abfälle bereits in konkreten Fällen genehmigt und durchgeführt [5, 6].

In allen Anwendungsbereichen, die sich mit der Nutzung von Salzlagerstätten beschäftigen, sind gebirgsmechanische Untersuchungen unabdingbar, um sowohl die Betriebssicherheit für die Bergarbeiter und den Schutz der Umwelt zu gewährleisten als auch eine ökonomisch optimale Ausnutzung der Lagerstätte zu erreichen. In den Anfängen des Kalibergbaus wurde die Dimensionierung von Kammern und Pfeilern rein empirisch durchgeführt, indem man sich schrittweise an größere Extraktionsraten herantastete. Diese Herangehensweise war demnach natürlich mit verhältnismäßig hohem Risiko sowohl für die Integrität und Stabilität des Hangenden als auch die Sicherheit der Bergleute unter Tage verbunden. Dies gilt umso mehr, da die Erfahrungswerte aus einem bestimmten Abbau aufgrund von unterschiedlicher Geologie, Teufenlage oder Steinsalzvarietät nicht notwendigerweise direkt auf andere Bergwerke übertragbar sind.

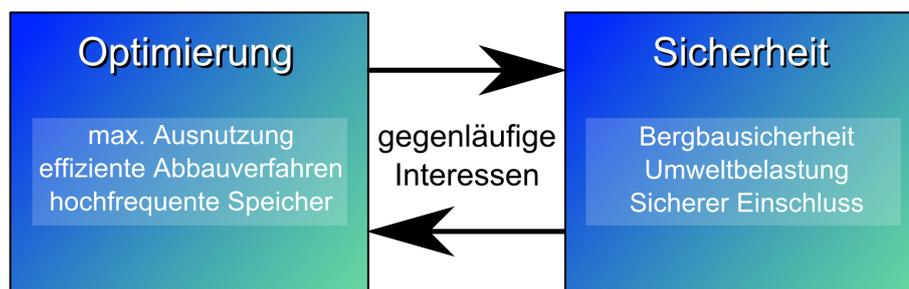


Abb. 1.2: Notwendigkeit eines Kompromisses zwischen wirtschaftlicher Optimierung und gleichzeitiger Gewährleistung von Sicherheitsstandards.

Aus diesem Grund steht die heutige Dimensionierung und allgemeine Begutachtung von Aufgabenstellungen im Kalibergbau auf zwei Säulen: Die laborative Untersuchung

der Verformungs- und Festigkeitseigenschaften der lokalitätsspezifischen Gesteine und die Simulation der relevanten Mechanismen basierend auf komplexen Stoffgesetzen zur Umsetzung der experimentell ermittelten Materialcharakteristiken sowie der möglichst realitätsnahen Abbildung der Problemgeometrie. Die Computersimulation zur Untersuchung verschiedenster Aufgabenstellungen vom konventionellen Gewinnungsbergbau über Kavernenspeicherung bis hin zur Endlagerung radioaktiver Abfallstoffe hat sich durch die rasante Entwicklung der Rechentechnik heute als essentielles Werkzeug für die Stabilitäts- und Integritätsbewertung etabliert [7].

Im Rahmen dieser Arbeit wird mit dem diskontinuumsmechanischen Ansatz eine neue Modellierungsmethodik vorgestellt, die signifikante Vorteile gegenüber konventionellen kontinuumsmechanischen Berechnungen bietet und insbesondere in der Lage ist, zusätzliche integritätsrelevante Prozesse explizit abzubilden. Die Notwendigkeit eines solchen erweiterten Modellierungsansatzes wird zunächst in Kapitel 2 anhand von experimentellen Untersuchungen zum Einfluss der Mikrostruktur auf das Gesamtverhalten unter thermo-hydro-mechanischer Belastung motiviert. Darauf folgt in Abschnitt 3 ein kurzer Überblick über die Möglichkeiten und Grenzen der etablierten rein kontinuumsmechanischen Beschreibung (Finite-Element (FE [8]) bzw. Finite-Difference (FD [9])) und der darauf aufbauenden XFEM-Methode [10]. In Kapitel 4 wird dann zunächst der grundlegende theoretische Hintergrund des Programmablaufes diskontinuumsmechanischer Simulationen erläutert sowie die Funktionsweise und Implementation der am Institut für Gebirgsmechanik Leipzig entwickelten Stoffmodelle für Salzgesteine vorgestellt. In diesem Zusammenhang wird dann die Darstellung polykristalliner Materialien durch die zwei- und dreidimensionale Voronoi-Zerlegung erläutert. Basierend auf derartig zerlegten Modellstrukturen folgen dann einfache Untersuchungen zum mechanischen (Kapitel 5) und hydraulischen (Kapitel 6) Verhalten dieser komplexen Systeme, die gleichzeitig als Prüfung der Funktionalität der verwendeten diskontinuumsmechanischen Rechencodes dienen. Gleichzeitig wird ein konsistenter Parametrisierungsansatz vorgestellt, der es erlaubt, das experimentell ermittelte Verformungsverhalten in den Simulationen zu replizieren.

Zur umfangreichen Validierung werden dann in Kapitel 7 zahlreiche Laborversuche mittels der diskontinuumsmechanischen Methode unter Verwendung der abgeleiteten Parametrisierung nachgerechnet. Dabei werden verschiedenste Versuchsformen, Prüfkörpergeometrien und Belastungsarten inkl. hydraulischer Beanspruchung und Verheilung abgedeckt. Basierend auf der erfolgreichen Validierung enthält Kapitel 8 anschließend Anwendungs-

beispiele des diskontinuumsmechanischen Ansatzes zur Untersuchung praxisrelevanter Aufgabenstellungen an großräumigen Modellen. Abschließend werden in Kapitel 9 die gegenwärtigen Vor- und Nachteile des Ansatzes sowie weitere Entwicklungsperspektiven und Optimierungsmöglichkeiten diskutiert.

Kapitel 2

Salzgestein als Diskontinuum

2.1 Charakteristika und Mechanismen des makroskopischen Verformungsverhaltens von Steinsalz

Auf mikroskopischer Ebene stellt Steinsalz ein Diskontinuum von ineinander verwachsenen Salzkristallen dar (Abb. 2.1). Das makroskopische Verformungsverhalten wird dabei nicht



Abb. 2.1: Steinsalzproben mit deutlich erkennbarer Mikrostruktur.

allein von den Verformungsmechanismen innerhalb des NaCl-Gerüsts der Kristalle [11] bestimmt, sondern ergibt sich insbesondere auch aus dem Zusammenspiel von intra- und interkristallinen Wechselwirkungen. Im folgenden Abschnitt soll daher ein umfassender Überblick über das Verhalten von Salzgesteinen unter mechanischer, hydraulischer und thermischer Belastung als direkte Folge der diskontinuumsmechanischen Struktur präsentiert werden. Zunächst werden die zentralen Charakteristika des elasto-visko-plastischen Materialverhaltens von Steinsalz aus Sicht experimenteller Untersuchungen dargestellt,

bevor daraufhin eben jenes Verformungsverhalten auf Basis von inter- und intrakristallinen Verformungsprozessen erklärt wird.

In Abb. 2.2 wird ein charakteristisches Beispiel der Tragfähigkeit einer Steinsalzprobe im weggeregelteten, einachsialen Druckversuch gezeigt, bei dem der Prüfkörper zwischen zwei Druckplatten mit konstanter Geschwindigkeit gestaucht wird. Typisches Steinsalz

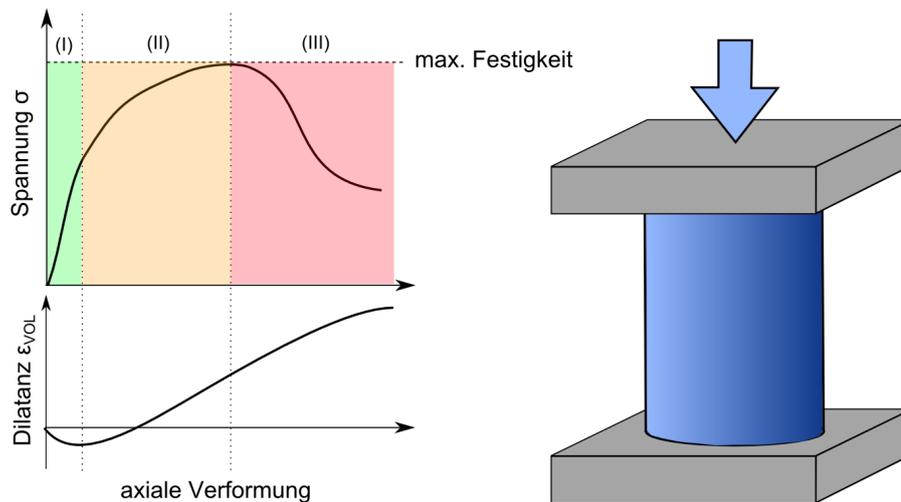


Abb. 2.2: Charakteristisches Spannungs-Verformungs-Diagramm für Steinsalz im einachsialen Druckversuch.

zeigt demnach im Laborversuch nach der elastischen Anfangsreaktion (I) eine deutliche plastische Verfestigungsphase (II). Nach Überschreitung der Maximalfestigkeit erfolgt dann eine eher duktile Entfestigung mit langsamem Spannungsabfall (III). Das Einsetzen der Auflockerung des Materials beim Übergang von (I) zu (II) äußert sich durch eine Veränderung in der Volumenentwicklung des Prüfkörpers: Nachdem das Volumen in der elastischen Reaktion zunächst mit zunehmender Kompaktion abnimmt, steigt es durch die mikroskopische Rissbildung und zunehmende Aufweitung dieser Risse bei einsetzender Schädigung wieder an (Abb. 2.2, unten).

Im Gegensatz zu diesem duktilen Verformungsverhalten des Steinsalzes verhält sich beispielsweise Carnallit bis zum Bruchpunkt fast quasi-elastisch und versagt in einem spröden Entfestigungsprozess [12]. Dieser signifikante Unterschied hat natürlich dementsprechende Konsequenzen für die Standsicherheitsbeurteilung und Systemstabilität von carnallitischen Abbaufeldern und lässt erneut die Vielfalt der Verformungscharakteristiken

von Salzgesteinen erahnen. Entsprechende gebirgsmechanische Modellierungen müssen also in der Lage sein, ein großes Spektrum von Materialcharakteristiken abzubilden.

Die Betrachtung einer Reihe von triaxialen Druckversuchen an typischen Steinsalzprüfkörpern macht weitere essentielle Eigenschaften deutlich (Abb. 2.3). Bei diesen Versuchen wird der Druckversuch bei verschiedenen lateralen Einspannungen durchgeführt. Mit zunehmender Einspannung steigt durch die aufgebrachte Stützwirkung die Festigkeit des Gesteins, während das Entfestigungsverhalten zunehmend duktiler wird, bis schließlich bei sehr hohen Einspannungen ein entfestigungsfreies plastisches Fließen dominiert. Unterhalb der quasi-schädigungsfreien Einspannungen beginnen mit zunehmender Verformung Schädigungsprozesse durch die Entwicklung von Mikrorissen. Die dabei auftretende dilatante Volumenzunahme ist umso ausgeprägter, je geringer die Einspannung des Salzgesteines ist.

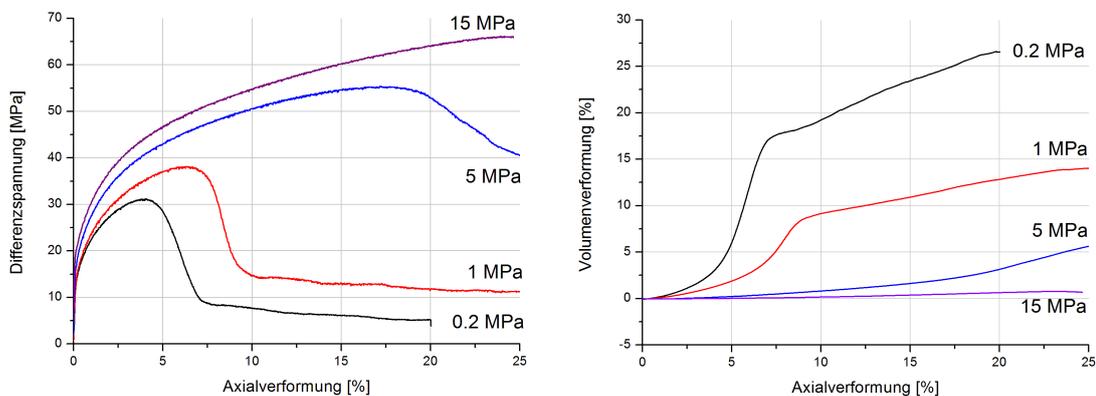


Abb. 2.3: Charakteristische triaxiale Druckversuche an Steinsalzproben.

Das mechanische Verformungsverhalten des Salzgesteines lässt sich bezüglich dieser Beobachtungen also in folgende Kernpunkte zusammenfassen [13]:

- Die Fließ- bzw. Bruchgrenze ist nichtlinear und abhängig von der minimalen Hauptspannung
- die Entfestigung ist verformungs- und spannungsabhängig
- bei hoher Einspannung dominiert plastisches Fließen ohne Entfestigung
- die Dilatanz ist stark abhängig vom Einspannungszustand

Zu diesen Effekten gesellt sich ein weiterer charakteristischer Verformungsmechanismus von Salzgesteinen: das Kriechen [14]. Dabei handelt es sich um eine zeitabhängige, volumentreue Verformung, die durch deviatorische Spannungen ausgelöst wird. Der

Kriechprozess versucht dabei, eben jene Differenzspannungen auszugleichen, sodass der Spannungszustand in ungestörten Salzlagerstätten typischerweise annähernd isotrop ist [15]. Im Allgemeinen wird das Kriechverhalten in drei Phasen eingeteilt [16]: das primäre, sekundäre und tertiäre Kriechen (Abb. 2.4).

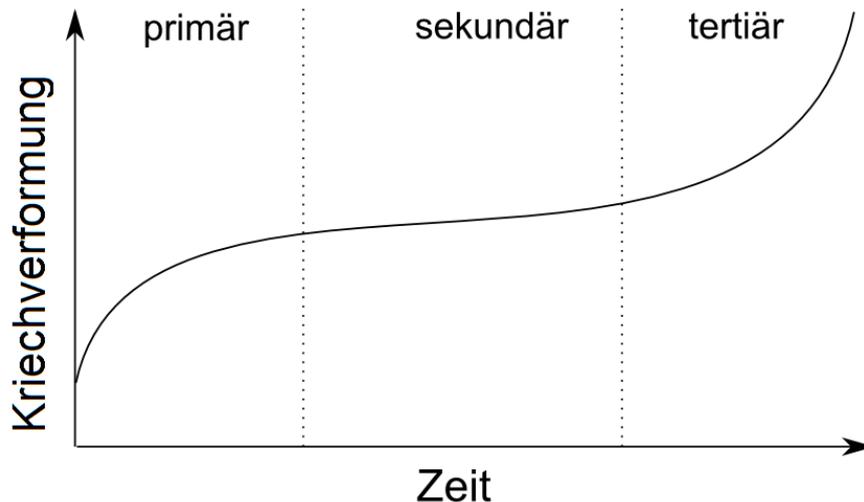


Abb. 2.4: Die drei Phasen des Kriechprozesses.

Das primäre Kriechen wird auch als transientes Kriechen bezeichnet und tritt unmittelbar nach Beginn bzw. Änderung der Belastung in Erscheinung. Es bewirkt eine Kriechverformung mit degressiver Kriechgeschwindigkeit, die sich langsam einem konstanten Wert annähert. Das darauffolgende Kriechen mit dieser konstanten Geschwindigkeit ist das sog. sekundäre Kriechen und wird auch als stationäres Kriechen bezeichnet. In der tertiären Kriechphase steigt die Verformungsgeschwindigkeit schließlich wieder an und führt letztendlich zum Kriechversagen. Die tertiäre Phase muss nicht notwendigerweise auftreten, sondern nur dann, wenn die Belastung des Prüfkörpers dauerhaft über der Dilatanzgrenze liegt. Die Dichte der Versetzungen im Kristallgitter ist stark abhängig von der Temperatur, wodurch auch der Kriechprozess extrem temperaturempfindlich ist. Bei hohen Temperaturen und Spannungen kann das Salz somit z.B. von Menschenhand geschaffene Hohlräume in kurzer Zeit verschließen (Abb. 2.5, [17]).

Mikroskopisch wird das Kriechen im praxisrelevanten Temperatur- und Spannungsreich vorrangig durch „dislocation creep“, d.h. die Bewegung intrakristalliner Versetzung im Kristallgitter des Steinsalzes, verursacht. Es liegen jedoch auch experimentelle Befunde vor, die nahelegen, dass unter bestimmten Randbedingungen durch sog. „pressure-solution creep“ auch Korngrenzeffekte maßgeblich zum Kriechprozess beitragen [18]. Dabei wird

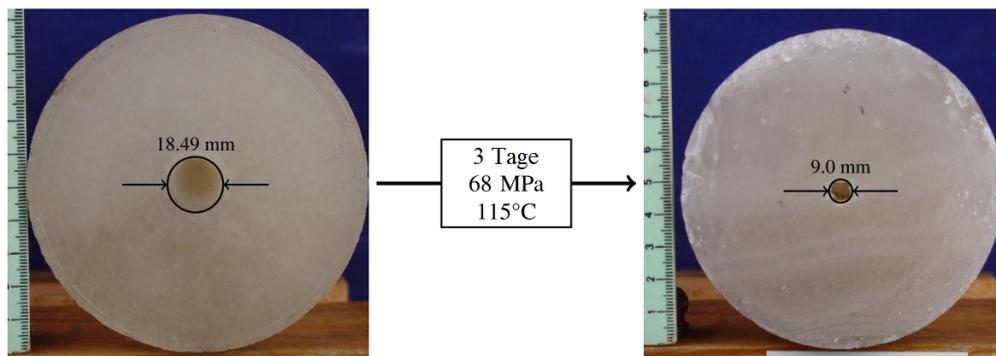


Abb. 2.5: Laborversuch zur kriechinduzierten Schließung eines Bohrloches unter Randbedingungen, die einer Teufenlage von ca. 3 km entsprechen.

davon ausgegangen, dass sich stark beanspruchte Korngrenzen unter der Anwesenheit geringer Mengen gesättigter Sole auflösen und dann unter geringerer Einspannung rekristallisieren. Gleichzeitig wird dieser Prozess von Kornrotationen und interkristallinen Scherbewegungen begleitet. Zwar zeigt sich im Bereich der deviatorischen Spannungen typischer Kriechversuche (>10 MPa) i.A. eine deutliche Dominanz des Versetzungskriechens, jedoch ist das Regime unter geringeren Spannungen aufgrund der entsprechend kleinen Kriechraten und hohen Sensitivität gegen äußere Einflüsse kaum experimentell belegt. Langzeitkriechversuche an Steinsalzproben von Avery Island, die in einem abgelegenen Bereich der Varangéville-Mine bei möglichst geringen Störungen und konstanter Temperatur durchgeführt werden, unterstützen zunächst die Annahme eines zusätzlichen Kriechmechanismus bei kleinen Deviatorspannungen, da die dort ermittelte Kriechrate signifikant größer ist, als dies für reines Versetzungskriechen zu erwarten wäre [19]. Es ist allerdings fraglich, ob es sich dabei wirklich um die stationäre Kriechrate handelt oder ob sich die untersuchte Probe nicht vielmehr noch im transienten Bereich befindet, der bei geringer Auflast über sehr lange Zeiträume der dominante Mechanismus sein kann. Darüber hinaus erfolgt die Versuchsführung einachsial, d.h. auch Auflockerungseffekte sind nicht auszuschließen. Das konkrete Kriechverhalten bei geringen Deviatorspannungen (<1 MPa) ist also noch immer Gegenstand der Forschung und nicht belastbar belegt.

2.2 Mikroskopische Grundlage der belastungsinduzierten Verfestigung, Schädigung und Rissbildung

Die charakteristischen Verformungsmechanismen von Salzgesteinen basieren auf verschiedensten mikroskopischen Wechselwirkungen, für deren makroskopische Beschreibung bereits zahlreiche ausgefeilte Stoffmodelle entwickelt wurden. Zum Verständnis der Gesamtheit der auftretenden Effekte ist es jedoch notwendig, die zugrundeliegenden Mechanismen der Kristalldeformation, Rissbildung und -ausbreitung zu verstehen und auch auf Basis der Gesteinsstruktur zu beschreiben. Anhand der nachfolgenden Diskussion und Übersicht der relevanten inter- und intrakristallinen Deformationsprozesse soll motiviert werden, dass die diskontinuumsmechanische Mikrostruktur den zentralen Faktor für eine Vielzahl praktisch relevanter Effekte darstellt.

Prinzipiell lässt sich das Verformungsverhalten von Salzgesteinen in drei übergeordnete Mechanismen einteilen [20]:

- Ductile crystal slip plasticity (CSP)
- Brittle grain boundary microcracking (GBM)
- Grain boundary sliding (GBS)

Das viskoplastische Fließen wird dabei zwar von der Kristallplastizität (CSP) dominiert, jedoch sind alle drei Effekte koexistierende und kooperierende Mechanismen, d.h. dass makroskopisches viskoplastisches Fließen und lokale intergranulare Schädigung untrennbar miteinander verbunden sind. Jeder dieser Haupteffekte wird von der temperatur- und spannungsabhängigen Beteiligung untergeordneter Sub-Mechanismen charakterisiert. So enthält beispielsweise allein die Kristallplastizität mindestens fünf voneinander verschiedene Anteile, die zusammen das plastische Verhalten des Salzkristalles bestimmen [11]. Diese Mechanismen stehen dann wiederum in Wechselwirkung mit den Korngrenzeffekten, an denen sich durch Spannungskonzentrationen Scherbewegungen (GBS) und Rissöffnungen (GBM) einstellen. Im Zusammenspiel mit weiteren Einflüssen durch Faktoren wie Unreinheiten und Fluideinschlüssen ergibt sich allein aus der Mikrostruktur des Gesteins eine Vielzahl von Effekten, die das Verformungsverhalten maßgeblich mitgestalten [21]. In den nachfolgenden Abschnitten soll daher ein grober Überblick über die vielfältigen intra- und interkristallinen Verformungsmechanismen und deren gegenseitige Wechselwirkungen gegeben werden.

Betrachten wir das polykristalline Salzgestein als komplexes System von untereinander wechselwirkenden, unterschiedlich orientierten Kristallen, so ist es naheliegend zunächst isoliert die mechanischen Eigenschaften der Kristallmatrix selbst zu untersuchen, um somit auch den Einfluss der gegenseitigen Wechselwirkung später besser abgrenzen zu können.

Ein idealer Kristall wird durch eine spezifische periodische Anordnung von Atomen definiert und seine elastische Reaktion erfolgt durch die Auslenkung der Gitteratome aus ihrer Ruheposition. Basierend auf Ansätzen für die potentielle Energie der NaCl-Kristallatome wurde daher bereits 1923 von Zwicky der Versuch unternommen, einen theoretischen Wert für beispielsweise die makroskopische Zugfestigkeit zu ermitteln [22]. Die auf diese Weise berechnete theoretische Zugfestigkeit von ca. 2 GPa weicht allerdings um mehrere Größenordnungen von der Realität ab, was einen ersten Hinweis darauf liefert, dass für den makroskopischen Verformungs- und Versagensprozess andere Mechanismen verantwortlich sein müssen, sowohl auf inter- als auch intrakristalliner Ebene.

Im Gegensatz zur elastischen Verformung werden bei der irreversiblen Plastizität Verformungen durch Kristalldefekte als Abweichungen von der idealen Kristallstruktur induziert bzw. bestehende Defekte in Bewegung versetzt. Entsprechend der Komplexität dreidimensionaler Gitterstrukturen existieren ausführliche Klassifikationen von Gitterfehlstellen, z.B. nulldimensionale Punktdefekte durch fehlende bzw. substituierte Atome und eindimensionale Liniendefekte (Kombinationen von Schrauben- und Stufenversetzungen)[23]. Abbildung 2.6 stellt einige einfache Gitterdefekte schematisch dar.

Innerhalb eines Kristalls geschieht die plastische Verformung typischerweise durch eine relative Bewegung entlang von kristallographischen Ebenen als Folge der wirkenden Scherspannungen. Diese sog. „slip planes“ sind im Allgemeinen parallel zur Ebene der dichtesten Packung der Kristallstruktur orientiert. Innerhalb einer Gleitebene existieren dann ebenfalls bevorzugte Gleitrichtungen („slip directions“), die sich in analoger Art und Weise entlang der Richtung mit höchster Dichte ausbilden. Gleitebenen und Gleitrichtungen werden zusammen als Gleitsysteme („slip systems“) bezeichnet [24]. Die kritische Scherspannung, bei der eine Gleitbewegung entlang eines bestimmten Gleitsystems infolge einer aufgebrachten Belastung induziert wird, kann anhand von Spannungsprojektionen wie z.B. dem sog. Schmid'schen Schubspannungsgesetz [25] ermittelt werden.

Die Scherbewegung verteilt sich dabei nicht homogen auf den Kristall, d.h. es rücken nicht alle kristallographischen Ebenen gleichmäßig nach, sondern es bilden sich sog. Scherbänder, in denen sich die plastische Scherverschiebung lokalisiert. In Abbildung 2.7 wird

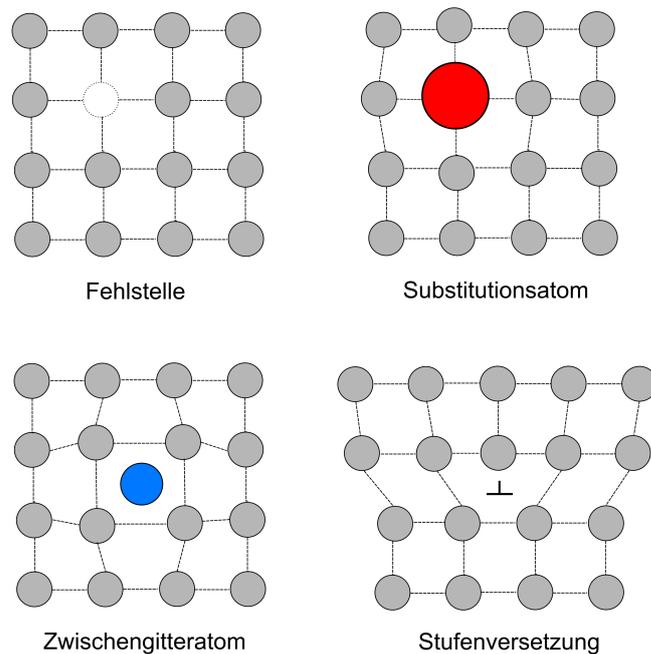


Abb. 2.6: Einfache Beispiele für Defekte in Gitterstrukturen.

am Beispiel einer Stufenversetzung gezeigt, wie sich zwei Gitterebenen schrittweise gegenseitig verschieben und dabei die Versetzung durch den Kristall wandert. Für diese schrittweise Migration ist eine deutlich geringere Scherspannung nötig als für die gleichzeitige Verschiebung des gesamten idealen Kristallgitters, weshalb diese Versetzungsbewegungen die treibende Kraft hinter der Kristallplastizität sind.

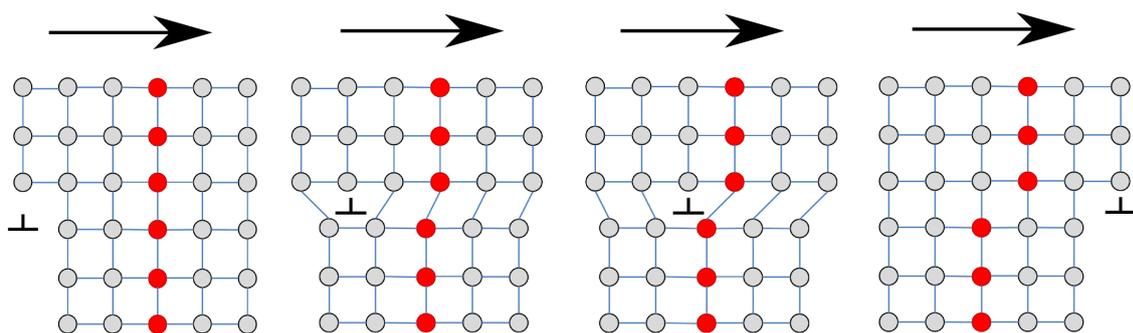


Abb. 2.7: Plastische Scherverschiebung durch Bewegung einer Stufenversetzung.

Der Ausbreitung dieser plastischen Verformung wirken wiederum andere Mechanismen entgegen, die zu einer hohen Temperatur-, Geschwindigkeits- und Spannungsabhängigkeit der makroskopischen Plastizität von Salzgesteinen führen. Zum einen behindern sich die Versetzungen bei ansteigender Versetzungsdichte zunehmend gegenseitig, was eine

fortschreitende plastische Verformung erschwert. Zum anderen werden die Fehlstellen im Kristall bei hohen Temperaturen und mit längerer Zeitdauer aber auch wieder abgebaut, wodurch sich das Material im Hochtemperaturbereich und bei langsamer Belastung äußerst duktil verhalten kann. Derartige Beobachtungen wurden bereits sehr früh in einfachen Plastizitäts- und Zuguntersuchungen an makroskopischen Steinsalz-Einkristallen durchgeführt. Schon in den 1930er Jahren wurden Ergebnisse von Reißfestigkeitsuntersuchungen an zylinderförmigen Stäbchen aus NaCl-Kristallen publiziert, in denen auch die Temperaturabhängigkeit der Zugfestigkeit erfasst wurde [25]. Bei schneller Zugbelastung zeigte sich ein spröder Zugriss bei einer Zugfestigkeit von ca. 4 MPa, wohingegen bei langsamer Belastung deutlich größere plastische Verformungsanteile zum Tragen kommen, wodurch sich sogar eine Reißverfestigung bis zu einer fast 30-fach erhöhten Zugfestigkeit einstellte.

Aufgrund der polykristallinen Struktur des Steinsalzes und der unterschiedlichen Orientierung angrenzender Salzkörner können sich die Scherversetzungen nicht über die Korngrenzen hinweg ausbilden (Abb. 2.8), wodurch es zu einer Akkumulation von Versetzungen an den Korngrenzen kommt, die dort zu Spannungskonzentrationen und darauffolgenden Scherbewegungen an den Korngrenzen führt. Der Effekt ist umso stärker, je größer der Orientierungsunterschied der angrenzenden Kristalle ist. Die Folgen dieses Prozesses werden im nachfolgenden Abschnitt näher thematisiert, während damit an dieser Stelle lediglich erneut die enge Verknüpfung von inter- und intrakristallinen Verformungsprozessen unterstrichen werden soll. Die Wirkung der Korngrenzen als blockierende Elemente der Kristallplastizität führt auch zu der an vielen polykristallinen Materialien gefundenen Abhängigkeit der Festigkeit von der mittleren Korngröße („grain boundary strengthening“ [26]).

Die auch als „glide“ bezeichnete plastische Verformung, die eben durch Akkumulation oder Vernichtung von Versetzungen behindert oder begünstigt wird, wird durch die Beteiligung weiterer Mechanismen noch komplexer. So können sich im sog. „cross slip“ Schraubenversetzung aus ihrer aktuellen Gleitebene in eine andere verschieben und somit z.B. Versetzungsblockaden umgehen, was sich dann durch stufenartige Strukturen in den Scherbändern äußert. Darüber hinaus sind auch Versetzungsbewegungen durch Atomdiffusion senkrecht zur Gleitebene möglich und werden als „climb“ bezeichnet. Gemäß seiner diffusiven Natur ist dieser Prozess stark temperaturabhängig und besonders für Kriechen bei hohen Temperaturen relevant. Diese Ansammlung verschiedener Mechanismen lässt sich noch um Effekte der Rekristallisation und Korngrenzmigration – insbesondere auch

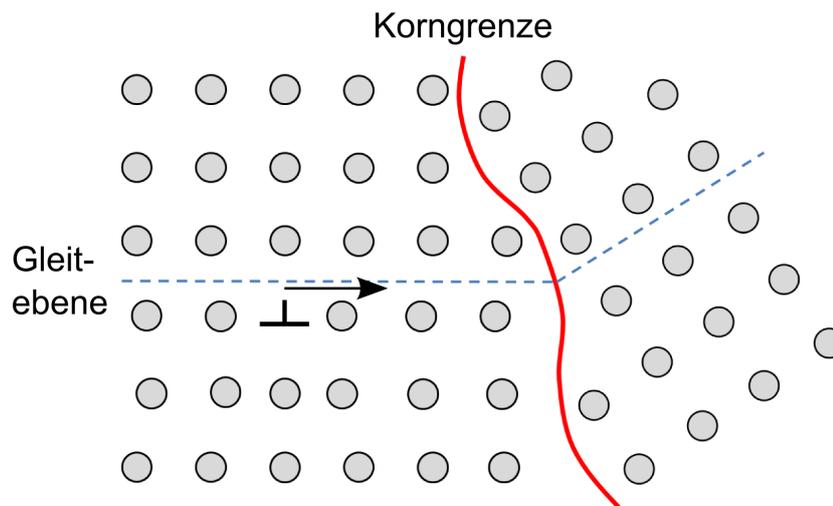


Abb. 2.8: Blockierung der Versetzungsausbreitung an den Korngrenzen unterschiedlich orientierter Kristalle.

im Zusammenhang mit Fluideinschlüssen – erweitern [11, 27], worauf in dieser Übersicht jedoch verzichtet wird.

Schon anhand dieses sehr groben Überblickes über einen Teil der intrakristallinen Verformungsprozesse lässt sich die hochkomplexe Abhängigkeit der Gesamtverformung von zahlreichen Randbedingungen erahnen, wobei der Einfluss der Korngrenzen für die makroskopische Schädigungsentwicklung bis hierhin nur angedeutet wurde. Im nachfolgenden Abschnitt werden daher experimentelle Studien und theoretische Überlegungen angeführt, die die Relevanz der Korngrenzeffekte GBM und GBS für das makroskopische Systemverhalten polykristallinen Salzgesteins unterstreichen.

Korngrenzen als Träger der Rissbildung und Schädigung

Die Gesamtverformung polykristalliner Materialien setzt sich aus intra- und interkristallinen Verformungsanteilen zusammen. Für das makroskopische Gesamtverhalten ist es damit von entscheidender Bedeutung, welchen Anteil der jeweilige Prozess an der Gesamtverformung und insbesondere an der Schädigungsentwicklung hat.

Es wurde bereits im vorangehenden Abschnitt angedeutet, dass sich die plastische Verformung der Salzkristalle an den Korngrenzen durch die Inkompatibilität der Kristallausrichtungen nicht fortsetzen kann und es demnach zu Spannungskonzentrationen durch lokale Anhäufungen von Versetzungen kommt. An diesem Punkt ist dann die jeweilige

intra- und interkristalline Festigkeit entscheidend dafür, ob eine Rissbildung entlang von Korngrenzen oder durch den Kristall selbst initiiert wird [28].

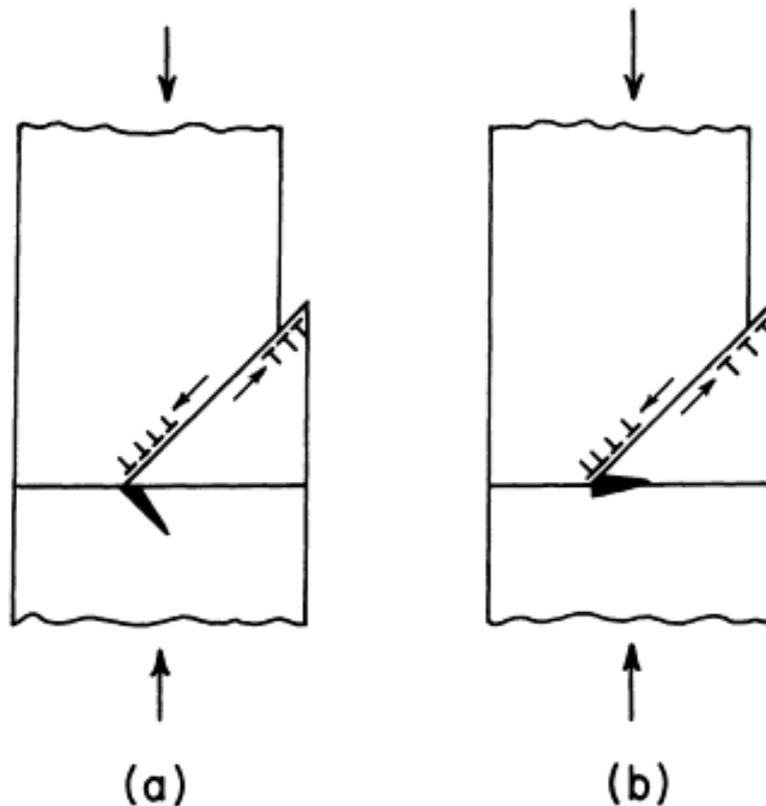


Abb. 2.9: Mögliche Rissentwicklung durch Versetzungsakkumulation an einer Korngrenze. (a) intra- und (b) interkristallin [28].

Dieser Gesamtprozess wurde in Bourcier et al. [20] anhand von optischen und elektronenmikroskopischen Aufnahmen an synthetisierten Steinsalzproben unter einaxialer Kompression beobachtet. Im Hinblick auf die plastische Anisotropie konnte dabei festgestellt werden, dass die plastische Verformung der Salzkristalle in Abhängigkeit der Orientierung ihrer Scherebenen zu jeweils unterschiedlichen Zeitpunkten einsetzte. Dies hatte zur Folge, dass es entlang der Korngrenzen zu Scherbewegungen und Öffnungen aufgrund von plastischer Inkompatibilität der beteiligten Salzkristalle kam. Damit werden nicht nur die vorangehenden Überlegungen zur Rissinitiierung an Korngrenzen bestätigt, sondern auch gezeigt, dass die Rissentstehung in Salzgesteinen primär entlang der Korngrenzen und nicht durch Risse in der Kristallmatrix selbst entsteht.

Ähnliche Befunde lieferten Untersuchungen der mikroskopischen Rissbildung bei der dilatanten Auflockerung während eines triaxialen Druckversuches durch akustische Emissionsmessungen (AE) [29]. Diese Versuche zeigten in der statistischen Verteilung ein

scharfes Maximum für Mikrorisse vom Typ 1, d.h. durch die interkristalline Öffnung von Korngrenzen entstandene Zugrisse. Die Lokationen der seismischen Signale zeigen eine zellulare Struktur mit Zellen in der Größenordnung von einigen Korndurchmessern (Abb. 2.10). Mit zunehmender Last erhöht sich die Dichte der Risse, die sich dann untereinander zu größeren Rissen verbinden. Klüfte vom Typ 2, d.h. intra-kristalline Risse entlang der kristallographischen Ebenen innerhalb der Salzkörner spielen bei dieser Generierung von Konnektivität nur eine untergeordnete Rolle, da sich die Rissbildung vorrangig entlang der Grenzflächen der Korngrenzstruktur ausbildet. Dies konnte durch die Auswertung von Röntgen-Untersuchungen an Steinsalzproben bestätigt werden, in die ein Di-Iod-Methan-Tracer injiziert wurde.

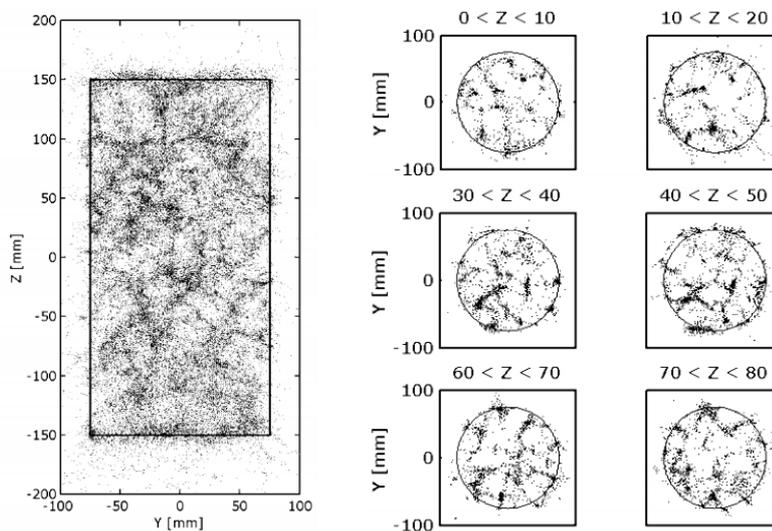


Abb. 2.10: Projektionen der AE-Ereignislokationen auf die Gesamtprobe (links) und in ausgewählten horizontalen Scheiben (rechts) in [29].

Anhand dieser Aussagen lässt sich das eingangs zusammengefasste Verformungsverhalten der Salzgesteine unter triaxialer Belastung im Hinblick auf die Relevanz der Kristallstruktur folgendermaßen beschreiben: Bei geringer Einspannung führt die Auflast zu einer Rissbildung im Material, wobei diese Risse überwiegend durch Öffnung der Korngrenzen als prä-existierende Schwächeflächen entstehen und nicht etwa durch das Aufreißen der Salzkörner selbst hervorgerufen werden. Dies folgt unmittelbar aus Ergebnissen der AE-Messungen und konnte auch optisch an Druckversuchen mit synthetischen Steinsalzproben bestätigt werden [30]. Die deutlich axial orientierte Rissstruktur in Abb. 2.11 unterstreicht darüber hinaus, dass die Rissbildung bevorzugt parallel zur maximalen Hauptspannung, d.h. senkrecht zur minimalen Hauptspannung verläuft.

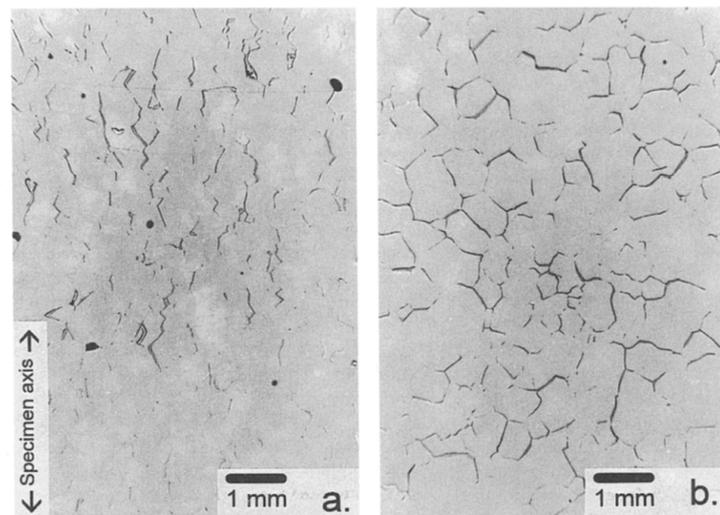


Abb. 2.11: Lichtmikroskopische Aufnahme einer geschädigten Steinsalzprobe im Vertikal- (a) und Horizontalschnitt (b) nach [30].

2.3 Fluidperkolation und Einschlussvermögen unter hydro-mechanischer Belastung

Für die Ausbreitung von Gasen und Fluiden innerhalb des Salzgesteines ist diese Entstehung und Vernetzung von potentiellen Fließwegen entlang der Korngrenzenstruktur von entscheidender Bedeutung [31]. Zahlreiche in-situ Beobachtungen und Untersuchungen bekräftigen die Aussage, dass Flüssigkeiten und Gase in Salzgesteinen überwiegend entlang interkristalliner Grenzflächen transportiert oder gespeichert werden: Im ungestörten Zustand können Gase und Flüssigkeiten auf den Korngrenzen sogar für Millionen von Jahren in isolierten Hohlräumen gebunden werden. Belege hierfür finden sich beispielsweise in großen Mengen CO_2 , die während des Tertiärvulkanismus vor über 20 Millionen Jahren druckgetrieben in das Steinsalz des Werra-Reviers verpresst wurden und dort zu einem großen Teil im grobkristallinen „Kristallbrockensalz“ eingeschlossen sind. Erst wenn das in überkritischem Zustand gespeicherte CO_2 beispielsweise durch Bergbautätigkeiten angebohrt wird, kann das Gas spontan freigesetzt werden [32]. Ein solcher Gasausbruch ereignete sich beispielsweise im Bergwerk Unterbreizbach (Abb. 2.12, links), bei dem sich das Gas durch die plötzliche Ausdehnung derart stark abkühlte, dass es einen CO_2 -Gletscher im Bergwerk bildete.

Ein analoges Beispiel für das Einschlussvermögen findet sich im Hauptsalz (z2HS) des Salzstockes Gorleben, in dem Kohlenwasserstoffverbindungen nachgewiesen wurden, die

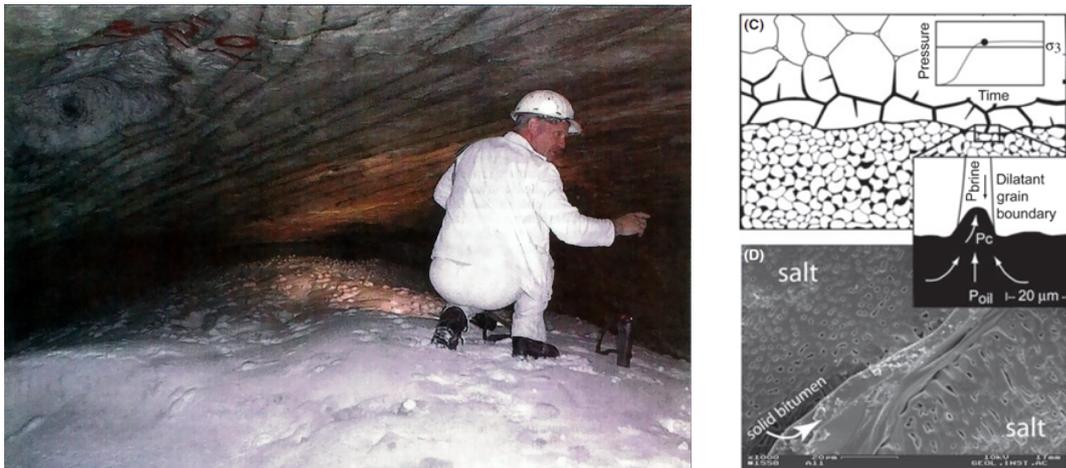


Abb. 2.12: Untertägiger CO_2 -Gletscher nach einem Gasausbruch (links) und druckgetriebenes Verpressen von Öl am Beispiel des Süd-Oman Salzbeckens (rechts, [33]).

sich ebenfalls hauptsächlich (>90 Vol.-%) auf den interkristallinen Korngrenzen befinden [34]. Ähnliche Beobachtungen wurden in Untersuchungen des Süd-Oman Salzbeckens gemacht [33]: Durch die Kompaktion der ölführenden porösen Gesteine (Dolomit & Anhydrit) – die sogenannten „Stringer“ – stieg der Öldruck über die minimale Einspannung des benachbarten Steinsalzes und führte damit zur druckgetriebenen Öffnung der Korngrenzen, wodurch Öl in die Steinsalzmatrix eindringen konnte. Diese Interpretation wurde durch den mikroskopischen Nachweis von Bitumen auf den Korngrenzen bekräftigt.

Die Generation und Vernetzung von Rissen und damit potentiellen Fließwegen durch mechanische Schädigung oder hydraulische Belastung wurde in zahlreichen Laborversuchen untersucht [35].

Mathematisch kann der Prozess der druckgetriebenen Öffnung von Korngrenzen über das Konzept der Perkolation beschrieben werden, das in Kapitel 6.1 ausführlich erläutert wird.

2.4 Verheilung

Im Vergleich zur Schädigungsentwicklung ist das Verheilungsverhalten von Salzgesteinen deutlich weniger untersucht worden. Dabei ist eben jenes Verheilungspotential insbesondere im Hinblick auf das Prinzip des vollständigen Einschlusses bei der Endlagerung relevant, da z.B. die nachweisliche Rückbildung auffahrungsbedingter Konturschädigungen der Einlagerungsstrecken einen zusätzlichen Sicherheitsmechanismus belegen würde. Dement-

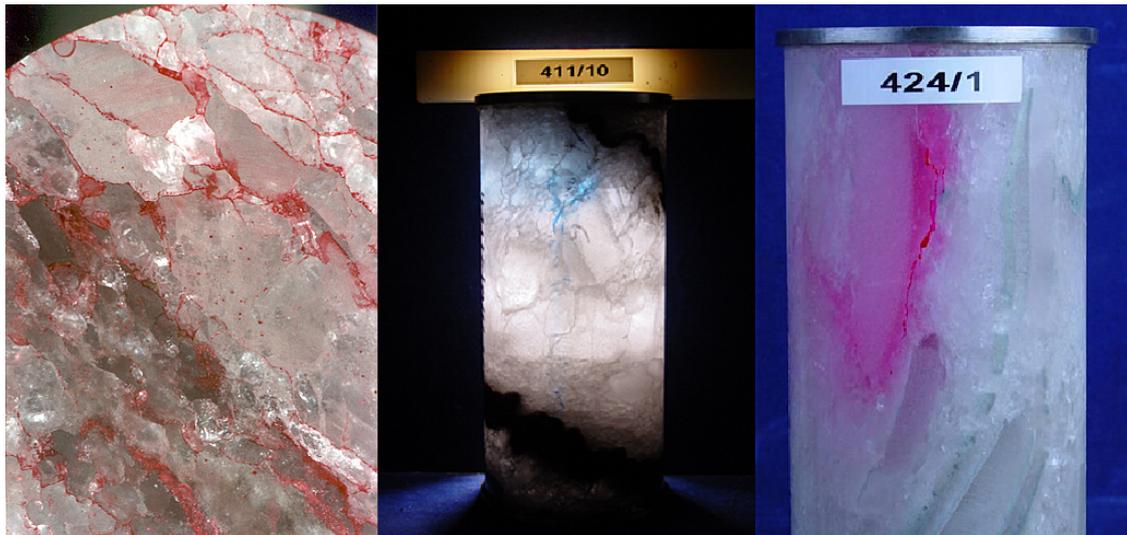


Abb. 2.13: Verteilung von Tracer-Flüssigkeiten entlang der Korngrenzen des Steinsalzes.

sprechend wurden für die WIPP-Site bereits 1990 erste Untersuchungen zur Verheilung von Steinsalz durchgeführt [36]. Dabei wurde an triaxial eingespannten Prüfkörpern der Manteldruck verringert und somit gezielt ein Schädigungszustand erzeugt, bevor die Einspannung wieder erhöht wurde. Aus Messungen der Schallgeschwindigkeit während der verschiedenen Belastungsphasen konnten Rückschlüsse auf die mikroskopische Schädigung gemacht werden. Insbesondere wurde der Anstieg der Wellengeschwindigkeiten und -amplituden in der letzten Phase als Zeichen der beginnenden Wiederverheilung interpretiert. Diese Befunde konnten in anderen Studien unter ähnlichen Versuchsanordnungen bestätigt werden [37, 38].

Aus mikroskopischer Sicht verläuft der Verheilungsprozess selbst sinngemäß umgekehrt zur Rissbildung an den Korngrenzen und kann grob in zwei Phasen gegliedert werden:

1. Rückbildung des Rissvolumens, Schließung der Rissöffnungen
2. Allmähliche Ausbildung kohäsiver Bindung an wieder geschlossenen Korngrenzen

Die Stärke bzw. die Geschwindigkeit des Verheilungsprozesses wird dabei maßgeblich von der Normalspannung auf den Korngrenzen, dem Feuchtigkeitsanteil und der Temperatur bestimmt [39, 40]. Je höher diese sind, desto schneller bilden sich die Korngrenzenbindungen wieder aus und führen zu einer Verheilung der einstigen Risse. Im Hinblick auf diese allmähliche Ausbildung von neuen Bindungskräften an aufeinandertreffenden Korngrenzen zeigt sich die diskontinuumsmechanische Mikrostruktur damit erneut als treibende Kraft hinter den makroskopischen Eigenschaften von Salzgesteinen. Aus diesem Grund

wird im Laufe dieser Arbeit auch ein Heilungsansatz für die diskontinuumsmechanische Modellierung vorgestellt und mit einigen bis dato existierenden phänomenologischen Verheilungsmodellen verglichen. In diesem Zusammenhang wird in Kapitel 7.4 der bisherige Kenntnisstand zur Verheilung von Salzgesteinen bezüglich experimenteller Evidenz und theoretischer Modellbildung noch einmal ausführlicher dargelegt. Im Rahmen dieses Abschnittes sollte der grundlegende Mechanismus lediglich zur Motivation der Relevanz der Mikrostruktur umrissen werden. Dieser grobe Überblick über die zentralen Eigenschaften von Salzgesteinen unter mechanischer und hydraulischer Belastung ermöglicht einen Einblick in den untrennbaren und komplexen Zusammenhang von Mikrostruktur und makroskopischem Verhalten. Zahlreiche integritätsrelevante Prozesse wie Schädigung, Perkolation oder Verheilung spielen sich vorwiegend auf den Korngrenzen ab, während gleichzeitig plastisches Fließen und Kriechen eher von der Kristallmatrix selbst ausgehen. Demnach liegt es nahe, diese verschiedenen intra- und interkristallinen Wechselwirkungen auch in geomechanischen Modellierungen explizit abzubilden. Um jedoch besser zu verstehen, warum die Abbildung dieser Mikrostruktur mit den Beschränkungen konventioneller kontinuumsmechanischer Programmansätze im Allgemeinen nicht möglich ist und welchen Weg die diskontinuumsmechanische Modellierung stattdessen geht, soll nachfolgend zunächst der grundlegende Ablauf kontinuumsmechanischer Berechnungen rekapituliert und bezüglich seiner einschränkenden Annahmen analysiert werden.

Kapitel 3

Merkmale und Grenzen der kontinuumsmechanischen Modellierung

Im Zuge der sprunghaften Entwicklung der Rechentechnik hat sich die Anwendung numerischer Rechencodes für die Modellierung von komplexen Stoffeigenschaften in geotechnischen und ingenieurgeologischen Aufgabenstellungen als wesentliches Hilfsmittel für die Optimierung, Dimensionierung und langzeitige Standsicherheitsanalyse etabliert. Als erster Ansatz wurde und wird hierbei die numerische Umsetzung der klassischen Kontinuumsmechanik für die verschiedenen Materialien verwendet, deren spezielle Verformungseigenschaften dann über Stoffmodelle beschrieben werden können. Insbesondere für Salzgesteine muss die Modellierung in der Lage sein, unterschiedlichste Besonderheiten und Verformungsmechanismen vom duktilen visko-plastischen Verhalten des Steinsalzes bis hin zum eher spröde versagenden Carnallit abzubilden [13]. Im Laufe langjähriger Forschung wurden für diese Stoffklasse daher am Institut für Gebirgsmechanik entsprechende kontinuumsmechanische Stoffgesetze entwickelt und in zahlreichen Aufgabenstellungen erfolgreich angewandt [41].

Die Familie der kontinuumsmechanischen Berechnungsansätze zur Lösung partieller Differentialgleichungen gliedert sich grob in die sogenannten „Finite-Element“ [42] – und „Finite-Difference“ [9] – Codes, deren methodischer Unterschied hauptsächlich in der jeweiligen Formulierung der zugrundeliegenden Differentialgleichung und dem zugehörigen Lösungsweg liegt. Tabelle 3.1 ordnet einige der geläufigeren Simulationscodes ihren numerischen Lösungsansätzen zu.

Ansatz	Code-Beispiele
Finite Element (FE)	Abaqus, Ansys, Nastran
Finite Difference (FD)	FLAC, FLAC3D
Distinct Element (DE)	UDEC, 3DEC

Tab. 3.1: Übersicht geläufiger Simulationscodes und ihrer Berechnungsmethode.

In beiden Methoden wird eine numerische Lösung einer vorgegebenen partiellen Differentialgleichung auf einem Raumgebiet Ω unter Berücksichtigung von vorgegebenen Randbedingungen angestrebt. Hierfür wird zunächst die für die Aufgabenstellung relevante Raumstruktur in zahlreiche kleinere Elemente zerlegt, die aus untereinander verbundenen Knotenpunkten bestehen. Diese Elemente können verschiedene Formen annehmen, jedoch sind in dreidimensionalen Fall Tetraeder und Quader die geläufigste Wahl. Abb. 3.1 zeigt die Zerlegung des Raumbereiches Ω für die Modellierung in einem kontinuumsmechanischen Programm.

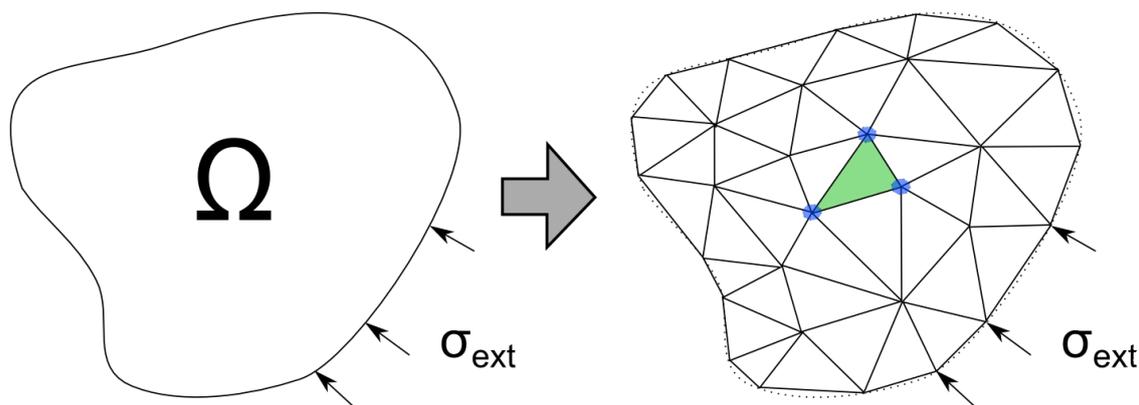


Abb. 3.1: Exemplarische Zerlegung des Raumes Ω in Dreieckselemente (grün) durch untereinander verbundene Knotenpunkte (blau).

Im Rahmen dieses Abschnittes soll der grundlegende Ablauf kontinuumsmechanischer Berechnungen in der Festkörpermechanik am Beispiel der zweidimensionalen Finite-Differenzen-Methode erläutert werden, da dieser Ansatz auch Bestandteil der in dieser Arbeit verwendeten diskontinuumsmechanischen Programme ist und deren Erläuterung in Kapitel 4 dann auf den hier vorgestellten Betrachtungen aufbauen kann. Darüber hinaus lassen sich die Einschränkungen konventioneller kontinuumsmechanischer Codes und die Notwendigkeit neuer Berechnungsansätze für die Modellierung von Salzgesteinen durch

die nachfolgenden Erläuterungen besser motivieren. Die Grundlagen des Finite-Element-Ansatzes werden jedoch in Abschnitt 9.2 aus Gründen der Vollständigkeit und im Zuge der Vorstellung alternativer Methoden und Entwicklungsansätze ebenfalls erläutert.

3.1 Finite-Difference-Methode

Die explizite FD-Methode basiert auf den Bewegungsgleichungen eines gedachten Punktes im Material,

$$\rho \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (3.1)$$

wobei i die jeweilige Komponente im kartesischen Koordinatensystem bezeichnet und die Einsteinsche Summenkonvention für doppelt auftretende Indizes gilt. In Gl. (3.1) ist u die i.A. gesuchte Verschiebung, ρ die Dichte, g der Gravitationsvektor und σ der Spannungstensor.

Das explizite FD-Verfahren löst eine Gleichung nun ausgehend von einem Initialzustand schrittweise, indem anhand der Bewegungsgleichungen immer wieder neue Positionen und Geschwindigkeiten der Gitterpunkte nach einem kurzen Zeitintervall berechnet werden, die ihrerseits neue Spannungen und Verformungen der Elemente ergeben. Genauer formuliert, wird zunächst für jeden Knotenpunkt ein Gesamtkraftvektor F ermittelt [43]:

$$F_i = F_i^Z + F_i^{ext} \quad (3.2)$$

Hierbei ist

$$F_i^Z = \int_C \sigma_{ij} n_j ds \quad (3.3)$$

der Gesamtbeitrag der internen Spannungen der angrenzenden Elemente. Der Vektor n_j ist dabei die nach außen gerichtete Normale zur geschlossenen Integralkurve C , die jeweils durch den Mittelpunkt der Kanten am Knotenpunkt führt und damit quasi den zum Knotenpunkt gehörigen Raum eingrenzt (Abb. 3.2). Mit diesem Raum lässt sich dann anhand der vorgegebenen Materialdichte eine Knotenpunktmasse m_i definieren. F_i^{ext} enthält die zusätzlichen äußeren Kräfte durch Randbedingungen, wie z.B. eine Gravitationskomponente.

Ausgehend von diesen Kräften werden neue Knotenpunktgeschwindigkeiten ermittelt durch:

$$\dot{u}_i(t + \Delta t/2) = \dot{u}_i(t - \Delta t/2) + F_i \frac{\Delta t}{m_i} \quad (3.4)$$

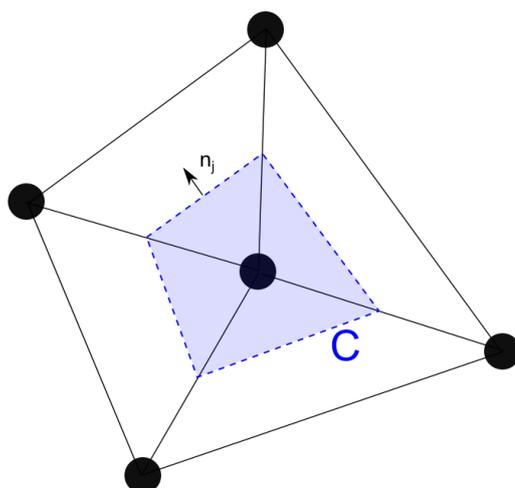


Abb. 3.2: Zugeordnete Fläche und Integrationskurve um einen Gitterpunkt zur Bestimmung der Kraftvektoren.

Der Zeitschritt Δt wird kleiner als die Zeit der kürzesten charakteristischen Eigenschwingung im System gewählt, so dass die ungestörte Informationsübertragung zwischen den Elementen gewährleistet ist, d.h.

$$\Delta t \lesssim 2 \cdot \min \left(\frac{m_i}{k_i} \right)^{1/2} \quad (3.5)$$

wobei m_i die zum Knotenpunkt gehörige Masse und k_i ein Maß für die Steifigkeit der umliegenden Elemente ist. Der Gesamtwert für k_i lässt sich berechnen durch

$$k_i = \sum_j \frac{8}{3} \left(K + \frac{4}{3}G \right) \frac{b_{max}^2}{h_{min}} \quad (3.6)$$

wobei die Summation über die alle anliegenden Elemente läuft, b_{max}^2 deren jeweils größte Kantenlänge und h_{min} die minimale Höhe der Dreiecks- oder Tetraederzone ist. K und G bezeichnen hierbei jeweils den Kompressions- und Schermodul des Materials. Aus den aktualisierten Geschwindigkeitsvektoren lassen sich dann prinzipiell die aktualisierten Verformungsraten und Rotationsanteile ermitteln:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \dot{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.7)$$

$$\dot{\theta}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \dot{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.8)$$

Für die numerische Berechnung dieser Werte werden jedoch die Ableitungen $\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j}$ benötigt. Die Bezeichnung „Finite Differences“ stammt ursprünglich von der Approximation eben solcher Ableitungen durch Differenzenquotienten an diskreten Stützstellen:

$$\frac{df(x)}{dx} \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (3.9)$$

Zur Ermittlung der Ableitungen in Gl. (3.7) und (3.8) benötigen wir eine derartige Approximation für den Mittelwert einer Funktion $f(x)$ auf einem Gebiet der Fläche A :

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial x_i} \right\rangle = \frac{1}{A} \int_A \frac{\partial f}{\partial x_i} dA = \frac{1}{A} \int_S n_i f ds \quad (3.10)$$

wobei im letzten Schritt der Gaußsche Integralsatz verwendet wurde und demnach n_i der nach außen gerichtete Normalenvektor auf Kurve S ist. Für ein Dreieckselement wird Gl. (3.10) zu:

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial x_i} \right\rangle = \frac{1}{A} \sum_S n_i \langle f \rangle \Delta s \quad (3.11)$$

Die Summe erstreckt sich dabei über die drei Dreiecksseiten mit jeweiliger Länge Δs und der Funktionswert wird als Mittelwert zwischen den Endpunkten der Seite angenommen. Damit ergibt sich letztendlich die Berechnung der gesuchten Ableitungen für Gl. (3.7) und (3.8) mit:

$$\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} \approx \frac{1}{2A} \sum_s \left(\dot{u}_i^{(a)} + \dot{u}_i^{(b)} \right) n_j \Delta s \quad (3.12)$$

Durch die inkrementelle Formulierung als Zeitschrittalgorithmus, können beliebige Stoffgesetze implementiert werden, indem aus dem alten Spannungszustand und neu ermittelten Verformungen und Verformungsraten aktualisierte Spannungszustände berechnet werden.

$$\Delta \sigma = f(\sigma, \Delta \epsilon, \Delta \dot{\epsilon}) \quad (3.13)$$

Im Falle eines isotropen, elastischen Materials berechnet sich die Spannungsänderung z.B. durch [44]:

$$\sigma_{ij} \rightarrow \sigma_{ij} + \left[\delta_{ij} \left(K - \frac{2}{3}G \right) \dot{\epsilon}_{kk} + 2G \dot{\epsilon}_{ij} \right] \Delta t \quad (3.14)$$

Durch diese Methodik lassen sich nicht nur hochgradig nichtlineare Stoffgesetze in einfacher Art und Weise implementieren, sondern auch dynamische Prozesse durch den expliziten Zeitschrittalgorithmus abbilden.

3.2 Grenzen der Kontinuumsmechanik

Aus den Grundannahmen der Kontinuumsmechanik folgen jedoch auch einige Einschränkungen, die eine Weiterentwicklung der numerischen Simulationsansätze notwendig machen. Beispielweise folgen der Entfestigung des Salzgesteines hohe Verformungen und demnach starke Verzerrungen des kontinuumsmechanischen Berechnungsnetzes. Da dieses Netz in der Regel in seiner Struktur erhalten bleiben muss, kann z.B. ein auf diese Weise modellierter Steinsalzpfeiler nicht die typischen Abschaltungen und Ausbrüche von Salzbrocken zeigen, wie sie in-situ beobachtet werden. Stattdessen verbleibt das versagte Material unrealistisch am intakten Pfeilerkern hängen, wodurch das Verhalten gerade im Langzeitprozess für den Bereich hoher Verformungen nicht adäquat abgebildet werden kann. Darüber hinaus bieten die hohen Verzerrungen der kontinuumsmechanischen Vernetzung das Potential für numerische Instabilitäten. Abb. 3.3 zeigt einen Probenkörper mit deutlich sichtbaren Scherrissen und ein zugehöriges, verformtes Berechnungsnetz. Die Orientierung der Scherbahnen wird zwar ersichtlich, jedoch kann der simulierte Pro-

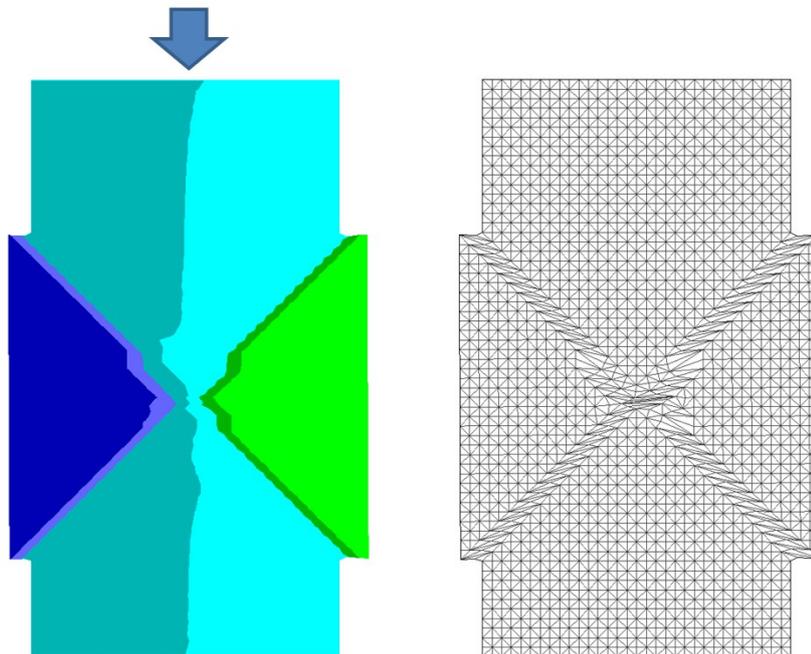


Abb. 3.3: Kontinuumsmechanischer Druckversuch mit verzerrter Vernetzung durch hohe Verformungen im Nachbruchbereich.

benkörper nicht in Bruchstücke zerfallen, wodurch die Modelltriangulation die hohen

Verformungen durch stark verzerrte Elemente darstellt. Ohne zusätzliche Modifikationen führen die Simulationen in diesen Zuständen häufig zum Abbruch.

Für derartige Situationen existieren in diversen Rechencodes sogenannte „Remeshing“-Techniken, die das Gitter an die neuen Konfigurationen anpassen sollen, um die Instabilitäten zu umgehen [45, 46]. Allerdings müssen dann weitere Vorkehrungen getroffen werden, um sog. „artificial stresses“ durch die Neuvernetzung zu minimieren. Alternativ behalten einige Finite-Element-Ansätze das undeformierte Referenzgitter bei und ermitteln die reale Konfiguration aus Abbildungsmatrizen, wodurch starke deformierte oder gar völlig kollabierte Berechnungsnetze noch behandelt werden können [47].

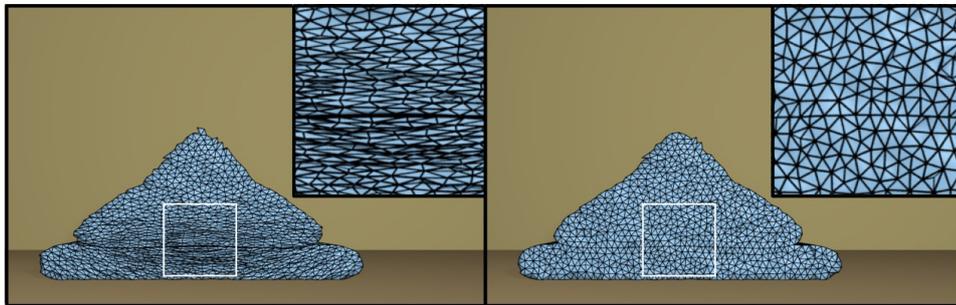


Abb. 3.4: Remeshing-Prozedur zur Neuanpassung eines stark deformierten Gitters [45].

Für die zentralen Effekte von Salzsteinen angefangen von Konturabschalungen über Pfeilerversagen bis hin zur Fluidperkolation auf Korngrenzen ist jedoch die diskontinuumsmechanische Mikrostruktur des Materials ausschlaggebend, die auch mit derartigen Modifikationen in der kontinuumsmechanischen Beschreibung derzeit nicht ausreichend berücksichtigt werden kann.

Kapitel 4

Diskontinuumsmechanische Modellierung

4.1 Grundidee und Berechnungsablauf der Distinct-Element Methode

Die „Distinct-Element“-Methode [48, 49] erweitert die Möglichkeiten der klassischen kontinuumsmechanischen Ansätze für die numerische Modellierung durch die Einführung eines weiteren übergeordneten Diskretisierungsgrades, der es erlaubt, voneinander unabhängige deformierbare Elemente zu beschreiben, die untereinander über besondere Stoffgesetze für Schichtflächen und Korngrenzen wechselwirken. Diese übergeordneten Strukturen werden nachfolgend schlicht als „Blöcke“ bezeichnet. Durch einen systematischen Kontakterkennungsalgorithmus wird im Laufe der Berechnung stets ermittelt, wo die diskreten Blöcke sich berühren. Die dort erstellten Kontaktflächen beschreiben dann das Scher- und Normalspannungsverhalten zwischen den Blöcken über beliebig komplexe Mechanismen. Abb. 4.1 zeigt die schematische Darstellung der Wechselwirkung zwischen den diskreten Elementen.

Es handelt sich also in diesem Sinne um eine Erweiterung der konventionellen FE- und FD-Methode, da die Verformung jedes einzelnen diskreten Blockelements über die kontinuumsmechanische Berechnung erfolgt, aber die verschiedenen Netze auch untereinander in systematischer Art und Weise interagieren. Insbesondere kann ein System aus vielen Blöcken durch Beanspruchung über das Versagen an den Kontaktflächen in seine

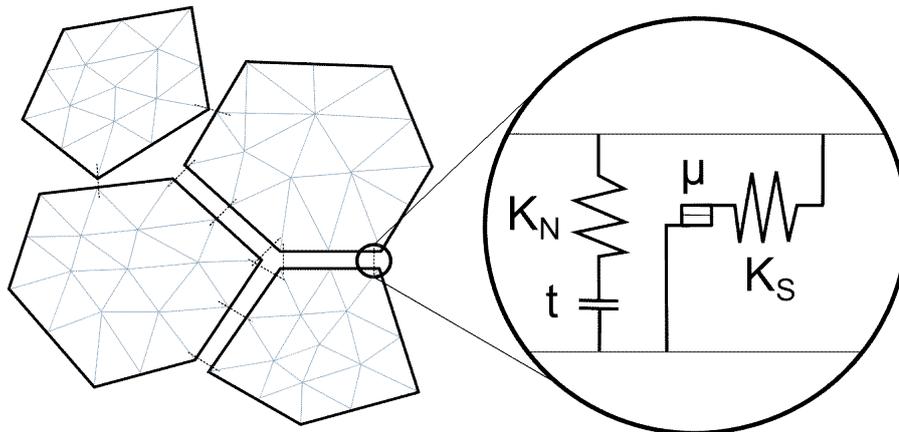


Abb. 4.1: Schematische Darstellung der Kontaktwechselwirkung zwischen angrenzenden deformierbaren, diskreten Elementen.

Einzelblöcke zerbrechen, was diesen Ansatz für die Anwendung vor dem Hintergrund der polykristallinen Salzstruktur besonders interessant macht.

Dadurch lassen sich mit dieser Methode auch stark nichtlineare und physikalisch instabile Prozesse mit dem möglichen Auftreten großer Deformationen und Verschiebungsreaktionen sowohl unter quasistatischen als auch dynamischen Belastungsbedingungen simulieren. Für die numerischen Modellierungen werden die diskontinuumsmechanischen Rechencodes UDEC (Universal Distinct Element Code) und 3DEC (3-Dimensional Distinct Element Code) der Fa. ITASCA eingesetzt [43, 50].

Die Strukturierung ermöglicht beispielsweise die Zuweisung der unterschiedlichen mechanischen Eigenschaften der geologischen Schichten zu den Blöcken. Speziell für geotechnische Problemstellungen sind zahlreiche Materialgesetze in UDEC und 3DEC bereits implementiert. Darüber hinaus können benutzerdefinierte Stoffmodelle integriert werden, welche eine bessere Anpassung an die spezifischen Eigenschaften der Gesteine ermöglichen. Die Programmcodes sind somit speziell für die Analyse diskontinuumsmechanischer Problemstellungen sehr gut geeignet und erlauben außerdem eine gekoppelte thermo-hydro-mechanische Analyse des Verformungs- und Bruchverhaltens.

Die Grundidee in dieser Arbeit besteht jedoch darin, die Distinct-Element-Methode nicht nur für makroskopische Übergänge und Schichtflächen zwischen unterschiedlichen geologischen Schichten anzuwenden, sondern die explizite Reproduktion der aus der Kornstruktur des polykristallinen Salzgesteins resultierenden Prozesse zu erreichen. Die Modellgeometrie wird hierfür durch eine Zerlegung in viele unterschiedlich geformte

Polyederblöcke mittels einer Voronoi-Triangulation dargestellt, die die diskontinuierliche Natur des Steinsalzes in den Simulationen in guter Näherung nachbildet. Hierfür wurde eine Methodik entwickelt, die beliebige zwei- und dreidimensionale Objekte in Voronoi-Strukturen für die Verwendung in UDEC und 3DEC herstellen kann (Kap. 4.3).

Ein weiterer Vorteil des diskontinuumsmechanischen Ansatzes ist, dass es damit möglich sein wird, die druckgetriebene Generierung von diskreten Fließwegen in gekoppelten hydro-mechanischen Simulationen explizit zu modellieren. Die Korngrenzen zwischen den Blöcken werden mit dem am IfG entwickelten Schermodell für Schichtflächen belegt (Kap. 4.2) und sind zunächst impermeabel, können sich jedoch im Laufe der Simulation durch Zug- oder Scherversagen öffnen, sodass eine Fluidpropagation entlang dieser entstandenen Fließwege stattfinden kann. Somit können neben den mechanischen Eigenschaften auch die zahlreichen relevanten Effekte bei der druckgetriebenen Fluidperkolation in das Salzgestein detailliert durch hydro-mechanische Simulationen in Kombination mit dem Schermodell für Diskontinuitäten beschrieben werden. Das mechanische Verhalten der Salzkristalle wird mit einem am IfG entwickelten visko-elasto-plastischen Stoffmodell beschrieben [41].

4.2 Stoffmodelle für inter- und intrakristalline Wechselwirkungen

4.2.1 Elasto-visko-plastisches Stoffmodell

Der Verformungs- und Bruchmechanismus von Salinalgesteinen wird von Standardmodellen, die teilweise bereits in den ITASCA-Rechencodes implementiert sind, nur ungenügend erfasst. Das duktile Verhalten, die ausgeprägten Nichtlinearitäten sowie die rheonomen bzw. viskosen Eigenschaften müssen durch ein speziell auf Salzgesteine ausgerichtetes Stoffgesetz beschrieben werden. Das am IfG entwickelte Materialgesetz für Salinalgesteine [13] basiert auf dem in Abb. 2.1 dargestellten Modellkonzept, welches die zeitunabhängigen und zeitabhängigen Komponenten erfasst.

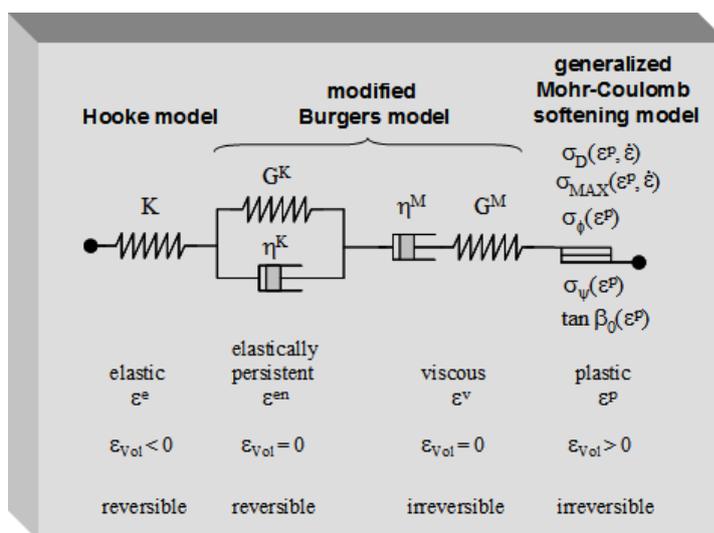


Abb. 4.2: Visko-elasto-plastisches Modellkonzept.

Gemäß dieser Struktur setzt sich die Gesamtverformung aus den folgenden Verformungsanteilen zusammen:

- elastische isotrope Kompression
- elastisch nachwirkender Verformungsanteil (*Kelvin-Element*)
- (deviatorisch) elastischer und viskoser Anteil (*Maxwell-Element*)
- plastischer Verformungsanteil (generalisiertes *Mohr-Coulomb-Modell*)

Das Modellkonzept (Abb. 4.2) des visko-elasto-plastischen Materialgesetzes basiert auf bewährten Standardmodellen der Mechanik und ist universell neben Steinsalz auch auf andere Salinargesteine und nichtsalinare Sedimentgesteine anwendbar. Das visko-elasto-plastische Entfestigungsmodell ist geeignet, sowohl duktiles Materialverhalten als auch Sprödbbruchverhalten von Gesteinen zu beschreiben.

Als Bruchkriterium wird ein verallgemeinertes nichtlineares *Mohr-Coulombsches* Fließkriterium verwendet [12]:

$$\sigma_{1B} = \sigma_D + N_\Phi \cdot \sigma_3 \quad (4.1)$$

mit der Reibungsfunktion

$$N_\Phi = 1 + \frac{\sigma_{MAX} - \sigma_D}{\sigma_\Phi + \sigma_3} \quad (4.2)$$

bzw.

$$\sigma_{\text{eff},B} = \sigma_D + \frac{\sigma_{MAX} - \sigma_D}{\sigma_\Phi + \sigma_3} \cdot \sigma_3 \quad (4.3)$$

wobei σ_3 die minimale Hauptspannung, σ_{1B} die maximale Hauptspannung (Bruchspannung), $\sigma_{\text{eff},B} = \sigma_{1B} - \sigma_3$ die maximal ertragbare Effektivspannung, $\sigma_D(\varepsilon^P)$ die einaxiale Druckfestigkeit, $\sigma_{MAX}(\varepsilon^P)$ die maximale effektive Festigkeit, $\sigma_\Phi(\varepsilon^P)$ der Krümmungsparameter der Festigkeitskurve und ε^P die plastische Scherverformung sind. Mit der Fließfunktion (4.3) wird die Dilatanzfestigkeit, die Bruchfestigkeit und die Restfestigkeit in Abhängigkeit von der plastischen Scherverformung beschrieben (Abb. 4.3). Der plastische Verformungsanteil wird aus einem plastischen Potential unter Verwendung einer nichtassozierten Fließregel abgeleitet, wodurch die für Sedimentgesteine typische Volumenvergrößerung (Dilatanz) infolge von Scherbeanspruchungen erfasst wird. Die spezielle mathematische Formulierung ist in [41] ausführlich nachzulesen.

Das für Salzgesteine typische viskose Materialverhalten ist dadurch gekennzeichnet, dass die Verformung bei konstanter Spannung ($\dot{\sigma} = 0$) anwächst und die Spannung bei konstanter Dehnung ($\dot{\varepsilon} = 0$) abnimmt. Diese Erscheinungen werden Kriechen und Relaxation genannt. Der zeitabhängige Verformungsprozess wird im visko-elasto-plastischen Materialmodell mit einem modifizierten *Burgers-Modell* beschrieben. Das so genannte primäre Kriechen tritt unmittelbar nach Belastungsbeginn ein und ist durch die Parameter G^K und η^K des *Kelvin-Modells* bestimmt. In der anschließenden sekundären Kriechphase ist nur die *Maxwell-Viskosität* η^M bestimmend für die Verformungen. Das tertiäre Kriechen ist verbunden mit einem dilatanten Entfestigungsprozess, der zum Kriechbruchversagen führen

kann. Die Spannungsabhängigkeit der Kriechrate wird im visko-elasto-plastischen Modell durch folgende Abhängigkeit der *Maxwell*-Viskosität von der deviatorischen Spannung σ_V berücksichtigt:

$$\eta^M = \frac{\eta_0^M}{\sinh \left[m \cdot \left(\frac{\sigma_V}{\sigma_V^*} \right)^n \right]} \quad (4.4)$$

mit $\sigma_V = \sqrt{3 \cdot J_2}$, wobei J_2 die zweite Invariante des Spannungsdeviators ist und m und n empirische Parameter sind.

4.2.2 Adhäsives Scherreibungsmodell für Kontaktflächen

Im diskontinuumsmechanischen Ansatz wird die Wechselwirkung zwischen angrenzenden Salzblöcken durch Scher- und Normalbewegungen entlang der Korngrenzen modelliert. Hierfür ist es in Analogie zur kontinuumsmechanischen Modellierung nötig, das Festigkeits- und Verformungsverhalten dieser Kontaktflächen mit einem entsprechenden Schermodell zu beschreiben.

Im Rahmen der Beschreibung des Verhaltens makroskopischer Schichtflächen und Diskontinuitäten wurde am IfG ein adhäsives Scherreibungsmodell entwickelt [41, 51, 52], das eine große Anzahl physikalischer Effekte der Haft- und Gleitreibung beschreiben kann und sich ebenso für die Modellierung mikroskopischer Korngrenzwechselwirkungen eignet.

Das Scherfestigkeitsmodell basiert auf einem grundlegenden Reibungsansatz in Form eines *Mohr-Coulombschen* Festigkeitsansatzes:

$$\tau_{MAX} = \mu \cdot \sigma_N + c \quad (4.5)$$

mit dem Unterschied, dass die Parameter des Modells keine Konstanten sind. Der Reibungskoeffizient

$$\mu = \mu_K \cdot (1 + \Delta\mu) \quad (4.6)$$

wird aus einem Term für die Gleitreibung

$$\mu_K = \tan \left[\Phi_R + i_0 \cdot \exp \left(-K_2 \frac{\sigma_N}{\sigma_K} \right) \right] \quad (4.7)$$

und für die Haftreibung

$$\Delta\mu = \Delta\mu_{vel} \cdot \exp\left(-K_1 \frac{\sigma_N}{\sigma_K}\right) \quad (4.8)$$

gebildet. Die Haftreibung resultiert aus der von der Normalspannung abhängigen Aktivierung von Adhäsions- bzw. Kohäsionskräften. c ist die Kohäsion bei verschwindender Normalspannung und Φ_R ist der Restreibungswinkel. i_0 ist der so genannte Aufgleitwinkel, welcher ein Maß für die Unebenheit der Kontaktflächen repräsentiert und für die Aufweitung des Scherspaltens bei zunehmender Scherverschiebung verantwortlich ist. σ_K ist die Druckfestigkeit der Kontaktfläche. K_1 und K_2 sind Krümmungsparameter, die sich aus der Anpassung des Modells an Versuchsergebnisse ergeben.

Die Abhängigkeit der Haftreibung von der Verschiebungsgeschwindigkeit v wird durch eine Funktion analog zu der Geschwindigkeitsfunktion des visko-elasto-plastischen Modells relativ zu einer kritischen Schergeschwindigkeit v_k berücksichtigt:

$$f_{vel} = \frac{1}{2} \cdot \left[1 + \tanh\left(b_s \cdot \log \frac{v}{v_k}\right) \right] \quad (4.9)$$

Der Haftreibungskoeffizient wird damit ausgedrückt durch

$$\Delta\mu_{vel} = \Delta\mu_{MAX} \cdot f_{vel} \quad (4.10)$$

Physikalisch ist dieser Zusammenhang so zu interpretieren, dass im Fall eines dynamischen Gleitprozesses bei hohen Schergeschwindigkeiten ($f_{vel} \approx 1$) ein Haftreibungswiderstand überwunden werden muss, bevor der Scherspannungsabfall einsetzt. Dagegen wird bei langsamen Scherverschiebungsraten ($f_{vel} \approx 0$) kein zusätzlicher Haftreibungswiderstand aufgebaut und die Kohäsion bleibt erhalten. Die Scherverschiebung findet praktisch ohne Abfall der Scherspannung statt (Abb. 4.4).

Neben der Geschwindigkeitsabhängigkeit wird auch die Abhängigkeit von der stattgefundenen Scherverschiebung im Modell berücksichtigt. Der Haftreibungskoeffizient wird um einen verschiebungsabhängigen Term (in inkrementeller Form) abgemindert:

$$\Delta\mu_s^p = -\Delta\mu_{vel} \cdot \frac{\Delta u_s^p}{L_1} \quad (4.11)$$

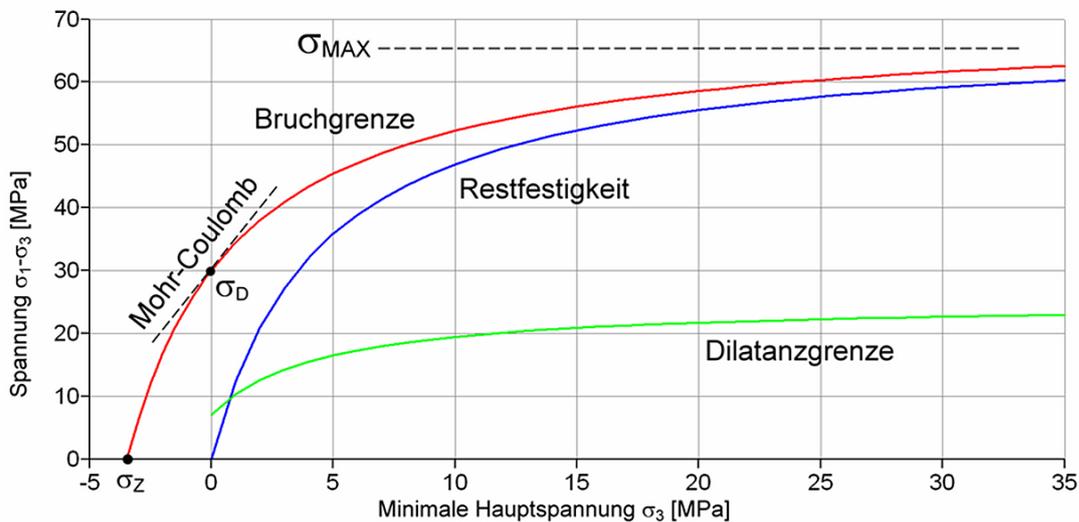


Abb. 4.3: Fließgrenzen des visko-elasto-plastischen Stoffmodelles.

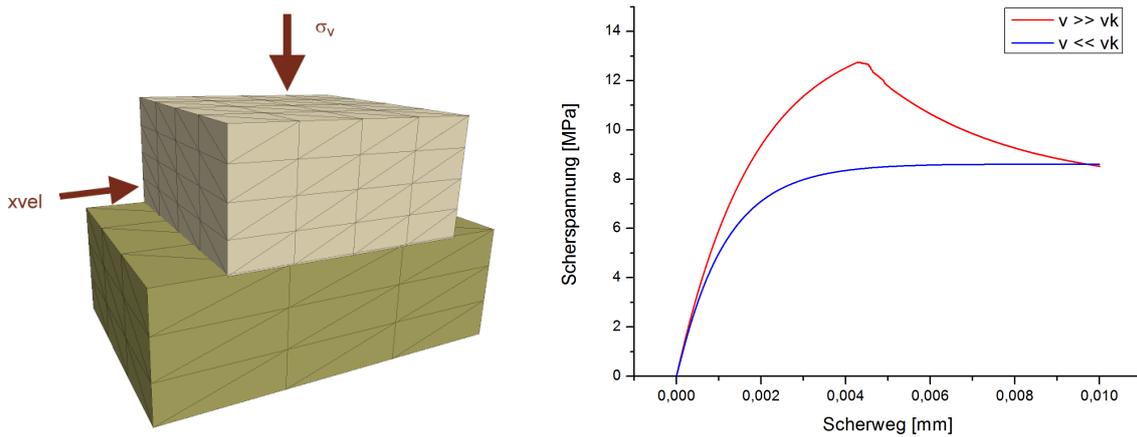


Abb. 4.4: Einfacher Scherversuch an einer einzelnen Schichtfläche (links) und Abhängigkeit der Scherfestigkeit von der Schergeschwindigkeit (rechts).

Darin ist Δu_s^p das Inkrement der plastischen Scherverschiebung. L_1 bestimmt die Steilheit des Scherspannungsabfalls im Nachbruchbereich. Mit zunehmender Scherverschiebung wird durch Abscheren der Unebenheiten ebenfalls der Aufgleitwinkel abgemindert:

$$\Delta i = -\Delta i_0 \cdot \frac{\Delta u_s^p}{L_2} \quad (4.12)$$

Die inkrementellen Beziehungen entsprechen einer Reduktion der Haftreibungskomponente und des Aufgleitwinkels in exponentieller Form während des Schervorgangs an den Kontaktflächen.

Die besonderen Eigenschaften des Schermodells sind damit:

- eine Peak-Scherfestigkeit mit adhäsiver Reibungskomponente
- die Abhängigkeit der adhäsiven Reibungskomponente von der Schergeschwindigkeit
- der Abfall der Scherfestigkeit mit fortschreitender Scherverschiebung sobald die maximale Scherfestigkeit überschritten wird

4.3 Darstellung polykristalliner Materialien durch Voronoi-Triangulation

4.3.1 Mathematische Grundlagen

Das grundlegende Konzept der diskontinuumsmechanischen Methode liegt darin, die inter- und intrakristallinen Wechselwirkungen innerhalb der Kornstruktur des Steinsalzes zu modellieren. Hierfür muss man in der Lage sein, Berechnungsmodelle aufzubauen, in denen die zentralen Charakteristiken eben jener Struktur in guter Näherung abgebildet werden können. Wie die nachfolgenden Ausführungen zeigen werden, bietet sich die Voronoi-Diskretisierung hierfür besonders an, da sie in der Lage ist, die unregelmäßige Polyederstruktur der Salzkristalle auf einfache Art und Weise zu reproduzieren.

Aus mathematischer Sicht handelt es sich beim Voronoi-Diagramm um eine Zerlegung des n -dimensionalen Raumes in einzelne Polygone – sogenannte Voronoi-Zellen – unter Berücksichtigung einer vorgegebenen Metrik. Zur einfachen Veranschaulichung gehen wir zunächst vom zweidimensionalen Fall mit euklidischer Metrik aus [53]: Sei $P = \{p_1 \dots p_n\} \in \mathbb{R}^2$ eine Menge paarweise verschiedener Punkte, d.h. $p_i \neq p_j$ für $i \neq j$ mit $2 \leq n \leq \infty$. Dann bezeichnen wir die Menge

$$V(p_i) = \{x \mid \|x - p_i\| \leq \|x - p_j\| \text{ f. } i \neq j\} \quad (4.13)$$

als Voronoi-Polygon des Punktes p_i .¹ Definitionsgemäß gehören zum Voronoi-Polygon eines bestimmten Punktes p_i demnach alle Punkte $x \in \mathbb{R}^2$, die näher zu p_i liegen als zu allen anderen Punkten der Menge P . Die Vereinigung aller Voronoi-Polygone $V = \bigcup_{p_i \in P} V(p_i)$ ist dann die vollständige Voronoi-Zerlegung und die entstehenden Polygone sind stets konvex. Abb. 4.5 zeigt die Voronoi-Zerlegung einer zufälligen und einer geordneten Punktmenge bezüglich der üblichen euklidischen Abstandsmetrik.

Erwartungsgemäß ist die Struktur und Größenverteilung der Voronoi-Zerlegung stark abhängig von der Lage und Dichteverteilung der zugehörigen Punktmenge. Insbesondere liegen die Voronoi-Zentren p_i im Allgemeinen nicht im Schwerpunkt des erzeugten Polygons. Im Falle einer zufälligen Punktmenge mit unerwünschten Häufungspunkten kann

¹Es ist zu beachten, dass obige Definition zu einer geschlossenen Voronoi-Zerlegung führt, da sie die Grenzen durch die Verwendung von \leq explizit einschließt. Eine offene Beschreibung mittels $<$ ist ebenfalls möglich, wird aber hier nicht verwendet.

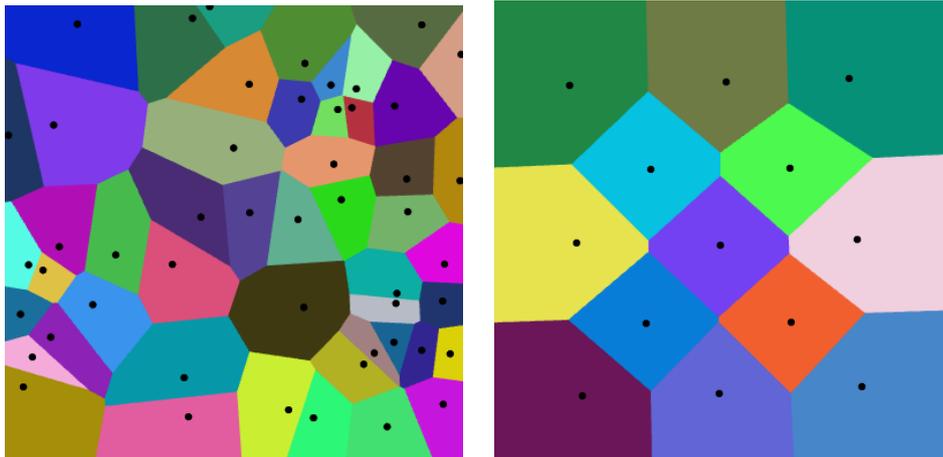


Abb. 4.5: Zweidimensionale Voronoi-Zerlegung einer zufälligen (links) und geordneten (rechts) Punktmenge.

dies für das iterative Ausgleichen der Häufungen genutzt werden, indem die ursprünglichen Punkte p_i auf den Schwerpunkt der Voronoi-Zelle verschoben werden und eine neue Zerlegung anhand der geänderten Positionen erzeugt wird [54]. Dies ist im Kontext der diskontinuumsmechanischen Simulation von besonderem Interesse für die Modellerstellung einer möglichst homogenen Kristallgrößenverteilung. Andererseits lassen sich durch eine absichtliche Manipulation der Punktdichte natürlich auch anisotrope Größenverteilungen erstellen.

Vergleicht man die auf diese Art und Weise erzeugte Anordnung mit dem Erscheinungsbild der Kornstruktur des Steinsalzes (Vgl. Abb. 2.1 in Abschnitt 2.1) wird eine immense Ähnlichkeit der beiden Anordnungen offensichtlich. Demzufolge lag es nahe, die diskontinuumsmechanische Simulation auf Basis von Voronoi-Zerlegungen durchzuführen. Die Erweiterung der obigen Definition der Voronoi-Diskretisierung auf drei Dimensionen erfolgt dabei ganz zwangslos durch die Verwendung einer Punktmenge und zugehöriger Metrik im dreidimensionalen Raum und zeigt auch dann eine beeindruckende Ähnlichkeit zu den in der Realität beobachtbaren polykristallinen Strukturen im Steinsalz.

4.3.2 Voronoi-Diskretisierung beliebiger Modellgeometrien

Um die diskontinuumsmechanische Simulation von Steinsalz mittels Voronoi-Modellen durchführen zu können, benötigen wir eine Methode, mit der wir quasi beliebige Geometrien als Ansammlung von Voronoi-Polygonen darstellen und in die Rechencodes UDEC & 3DEC einbinden können. Während UDEC eine eingebaute Routine besitzt, mit der zumin-

dest quasi-isotrope Voronoi-Zerlegungen erstellt werden können, ist derzeit keine solche Funktionalität in 3DEC enthalten. Aus diesem Grund musste ein Workflow entwickelt werden, der folgende Schritte ausführen kann:

1. Erstellung einer dreidimensionalen Punktmenge nach benutzerdefinierten Vorgaben (Dichte, Anisotropie)
2. Generierung einer 3D-Voronoi-Zerlegung basierend auf der Punktmenge und vorgegebenen Modellgrenzen und Geometrien
3. Umwandlung des Ergebnisses in 3DEC-kompatiblen Input

Punktmengengeneration

Zur benutzerdefinierten Erstellung der Punktmenge wurde das C#-Programm „VoroGen“ entworfen. Im einfachsten Falle erstellt das Programm eine zufällige Punktwolke innerhalb eines vorgegebenen Quaders basierend auf einem Monte-Carlo-Einsetzungsverfahren, wobei die Punkte als „hard spheres“ mit vorgegebenem Radius angesetzt werden. Das bedeutet, dass eine Einsetzung nur dann gültig ist, wenn keine Überlappung mit bereits vorliegenden Punkten besteht. Dies ist die unkomplizierteste Methode, um bei ausreichender Punktzahl eine Häufung von Punkten aufgrund des Abstandskriteriums zu verhindern. In einem weiteren Schritt kann der Kugelradius von der Raumposition abhängig variiert werden, um gezielt anisotrope Verteilungen zu erstellen, z.B. um bestimmte Bereiche mit einer höheren Punktdichte zu versehen. In Abb. 4.6 wird dies anhand einer anisotropen Punktverteilung demonstriert, deren Dichte mit zunehmender Entfernung vom zentralen Hohlraum kontinuierlich abnimmt.

Die Technik der Punktmengengenerierung lässt sich beliebig komplex erweitern. Für sehr große und dichte Punktmengen wird diese einfache Methodik allerdings ineffizient, da dann eine hohe Anzahl von Einsetzungsversuchen und Abstandsberechnungen benötigt wird. Für derartige Fälle und als generell eleganteres Einsetzungsverfahren kann eine Variation des so genannten Metropolis-Algorithmus [55] verwendet werden. Die Methodik stammt aus der Monte-Carlo-Simulation von Gleichgewichtszuständen, die durch effektives Einsetzen und Entfernen von Teilchen verschiedene Zustände thermodynamischer Ensembles erzeugen soll. Im Prinzip wird dabei das Einsetzen nicht völlig zufällig vorgenommen, sondern die Einsetzwahrscheinlichkeit des neuen Punktes anhand einer

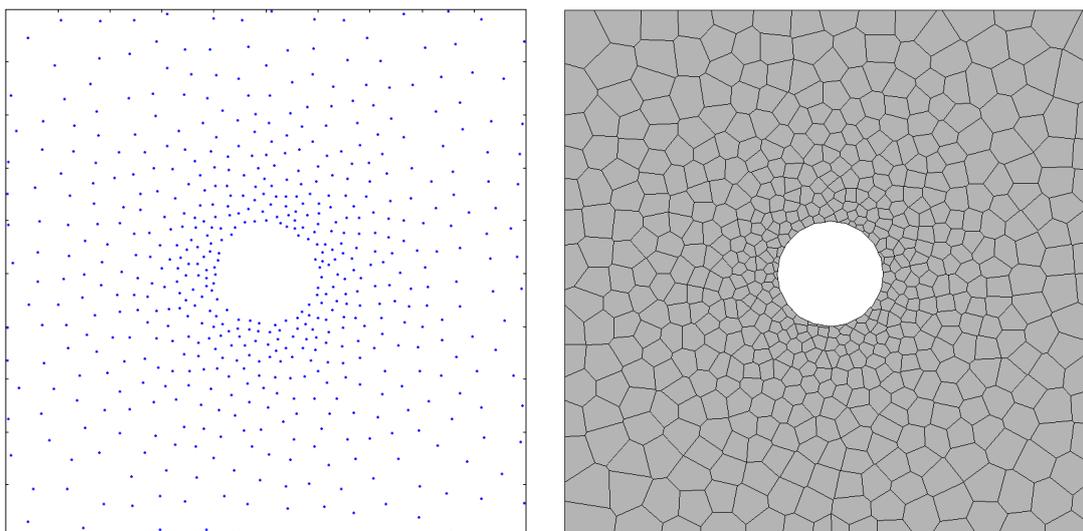


Abb. 4.6: Gezielt anisotrop verteilte Punktmenge (links) zur Erzeugung einer Voronoi-Zerlegung mit abstandsabhängiger Feinheit um einen Hohlraum (rechts).

positionsabhängigen Potentialfunktion berechnet. Die vorliegende Zielstellung liegt zwar abseits des ursprünglichen Anwendungsgebietes der Methode, führt aber dennoch auch in diesem Fall zu einem effektiven und eleganten Verfahren zur benutzerdefinierten Erstellung anisotroper Punktmenge.

Für das Einsetzen des $n+1$ ten Punktes an Position \vec{x} wird zunächst die fiktive „Energieänderung“ berechnet, die das Gesamtsystem durch den neuen Punkt erfährt. Diese Änderung setzt sich aus zwei Teilen zusammen:

- die Wechselwirkung U_{ij} mit den bereits eingesetzten Punkten
- eine globale Energiefunktion U_{global}

Für die Wahrscheinlichkeit, dass ein neuer Punkt an Position \vec{x} eingesetzt wird, gilt dann:

$$P_i(\vec{x}) = \min \left\{ 1, \exp\left(-\frac{\Delta E(\vec{x})}{\Delta E_0}\right) \right\} \quad (4.14)$$

wobei

$$\Delta E_i = \sum_{j=1, j \neq i}^n U_{ij}(\vec{x}) + U_{global}(\vec{x}) \quad (4.15)$$

und ΔE_0 ein Skalierungsfaktor ist.

Während die Paarwechselwirkung (z.B. ein Lennard-Jones-Potential [56]) sicherstellt, dass bevorzugt in einen bestimmten Abstandsbereich der bestehenden Punkte eingesetzt

wird, können durch das globale Skalarfeld U_{global} bestimmte Raumbereiche gezielt begünstigt oder benachteiligt werden.

Für den Großteil typischer Anwendungsfälle wird der Rückgriff auf diese erweiterte Technik zwar nicht zwingend notwendig sein, jedoch bietet der Ansatz eine flexible und konsistente Möglichkeit der Erstellung beliebig komplexer Punktmengen unter den verschiedensten Randbedingungen.

3D -Voronoi-Diskretisierung

Anhand der erzeugten zwei- oder dreidimensionalen Punktmenge kann nun die zugehörige Voronoi-Zerlegung erstellt werden. Hierfür war es nicht nötig, ein eigenes Programm zu entwerfen, da das frei erhältliche Tool „voro++“ in dieser Hinsicht alle wichtigen Funktionalitäten bietet [57]. Das Programm ist nicht nur äußerst schnell in der Lage, die 3D-Voronoi-Zerlegung beliebiger Punktmengen zu generieren, sondern kann darüber hinaus auch die Schnittflächen mit vorgegebenen einfachen Randbedingungsgeometrien (z.B. Ebenen, Zylinder) berücksichtigen. Somit kann die initial quaderförmige Bounding-Box innerhalb von voro++ zur letztendlich beabsichtigten Geometrie zurechtgeschnitten werden. In Abb. 4.7 sind einige Beispiele für verschiedene einfache Geometrien dargestellt.

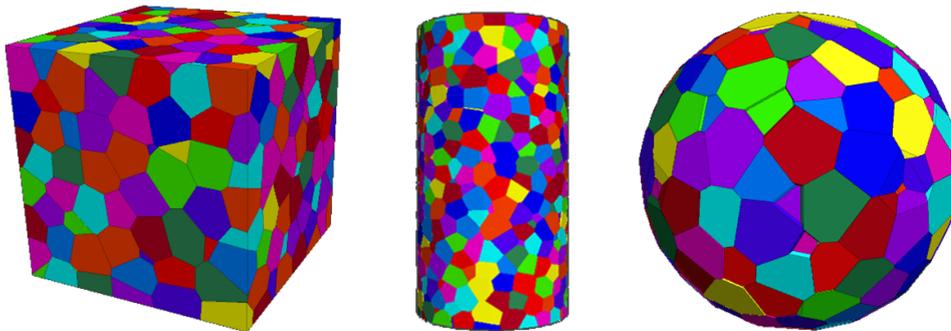


Abb. 4.7: Voronoi-Zerlegung bei verschiedenen geometrischen Randbedingungen.

Darüber hinaus kann der Benutzer über ein C++ Interface eigene Begrenzungstypen definieren und somit noch weitaus komplexere Geometrien – wie z.B. den Torus in Abb. 4.8 – erstellen. Diese Möglichkeit der Programmierung von benutzerdefinierten Grenzen wurde ausgenutzt, um die dreidimensionale Modellierung von gebirgsmechanisch relevanten Strukturen wie Abbaupfeilern oder Kavernen basierend auf 3D-CAD-Daten zu

gewährleisten. Die Umsetzung des Workflows soll nachfolgend anhand der Erstellung einer 3D-Voronoi-Zerlegung für eine Kaverne demonstriert werden.

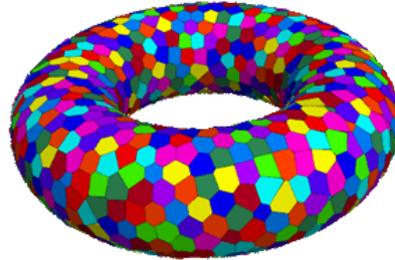


Abb. 4.8: Voronoi-Zerlegung eines dreidimensionalen Torus.

Ausgangspunkt für die Modellierung ist in diesem Fall die Sonarvermessung der Kaverne, aus der zunächst ein dreidimensionales Kavernenmodell innerhalb des CAD-Programmes Rhinoceros [58] erstellt wird (Abb. 4.9, links). Die vorher erzeugte Punktmenge kann dann importiert werden oder mittels der eingebauten Skriptsprache eine neue generiert werden. Ausgehend von dieser Punktmenge wird für jeden Punkt, der außerhalb der Kaverne liegt, der Abstandsvektor zur Kavernenkontur ermittelt und zusammen mit den Punktkoordinaten gespeichert. Dieser Input wird dann im C++ Quellcode unter Verwendung von voro++ eingelesen und bewirkt letztendlich, dass die konturnahen Voronoi-Elemente entsprechend der Orientierung der Kavernenkontur geschnitten werden, so dass die Ausgabedatei letztendlich die vollständige 3D-Voronoi-Zerlegung für das Kavernenmodell enthält (Abb. 4.9, rechts).

Für die konkrete Anwendung würde man natürlich nicht primär das Kaverneninnere, sondern vielmehr das umgebende Steinsalz, d.h. die Kavernenkontur und den Pfeilerbereich modellieren. Da dies für die Illustration des Ablaufes an dieser Stelle aber weniger anschaulich ist, wurde stattdessen die 3D-Voronoi-Diskretisierung des Kavernenhohlraums dargestellt. Aus Abb. 4.9 wird ebenfalls deutlich, dass die Qualität der Übereinstimmung mit dem CAD-Modell maßgeblich von der Dichte der Voronoi-Blöcke – und damit der zugrundeliegenden Punktmenge – bestimmt wird. Sind die Blöcke zu groß, so reicht die Approximation der Kontur durch eine einzelne Schnittfläche nicht mehr aus und es bilden sich deutlich abstehende Kanten. In analoger Art und Weise können somit beliebige Voronoi-Geometrien wie z.B. auch Abraumhalden (Abb. 4.10) für die diskontinuumsmechanische Modellierung generiert werden.

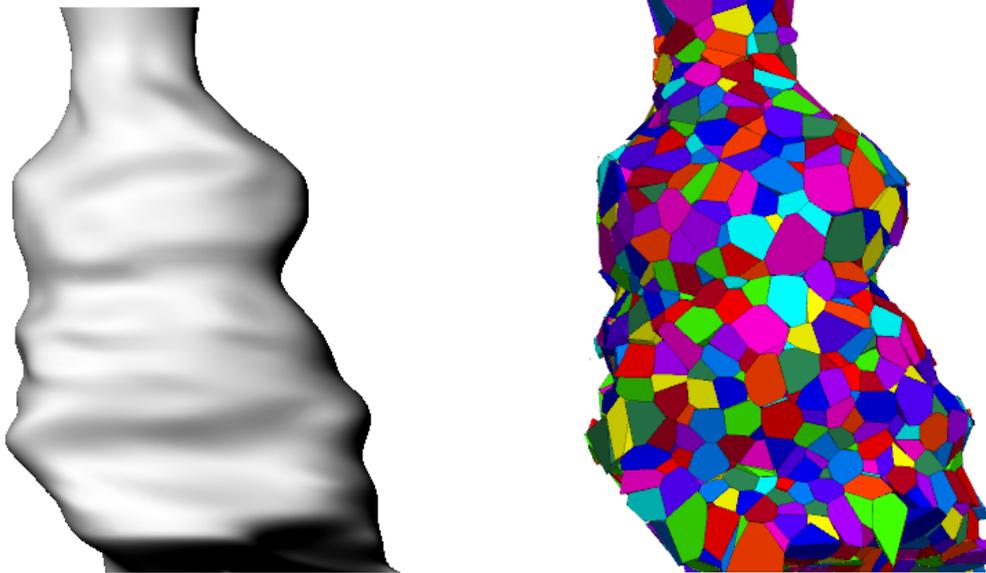


Abb. 4.9: Erstellung der 3D-Voronoi-Zerlegung eines Kavernenkörpers basierend auf Sonarvermessungsdaten.

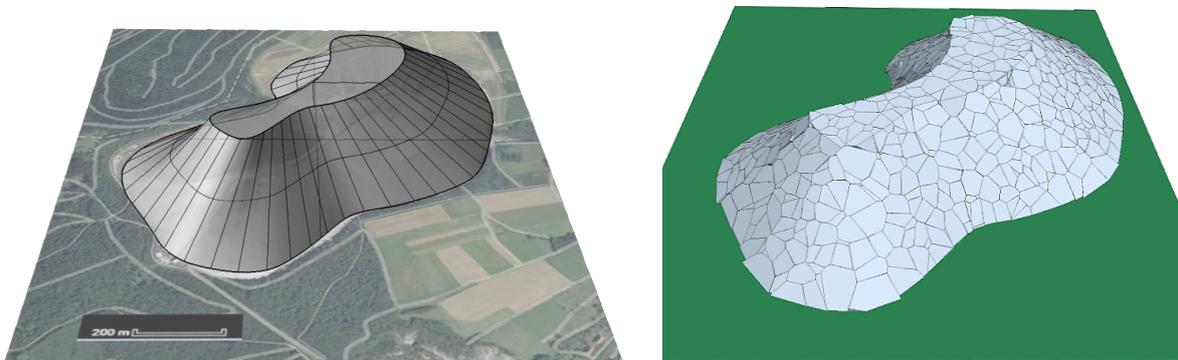


Abb. 4.10: 3D-Voronoi-Modell einer Abraumphalde.

4.3.3 Strukturanalyse von zwei- und dreidimensionalen Voronoi-Zerlegungen

Im Hinblick auf die Nachbildung der unregelmäßigen Kornstruktur polykristalliner Salzgesteine macht es Sinn, die strukturellen Eigenschaften der beschriebenen Voronoi-Zerlegungen auch aus statistischer Sicht zu untersuchen. Somit kann beispielsweise die Korngrößenverteilung und ihre Abweichung vom Mittelwert überprüft werden. Weiterhin ist zu bestätigen, dass die zufälligen Voronoi-Gitter über gleichverteilte Korngrenzorientierungen verfügen, d.h. dass es keine Überrepräsentierung bestimmter Orientierungen und damit bevorzugte Rissflächen gibt². Für diese statistisch motivierten Untersuchungen werden nachfolgend quadratische bzw. würfelförmige Blöcke in Voronoi-Elemente zerlegt. Dabei werden stets drei verschiedene Zerlegungen (Abb. 4.11) betrachtet, um die Unabhängigkeit der statistischen Eigenschaften von der konkreten Zerlegung zu zeigen.

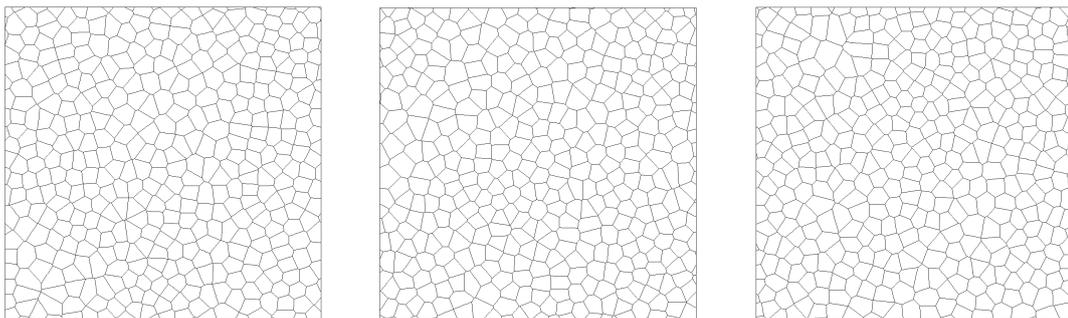


Abb. 4.11: Drei verschiedene 2D-Voronoi-Diskretisierungen bei gleichem mittleren Durchmesser.

Abb. 4.12 zeigt ein Histogramm der mittleren Voronoi-Durchmesser³, d.h. also die Wahrscheinlichkeit, dass ein bestimmter Voronoi-Block einen bestimmten Durchmesser hat, für einen vorgegebenen mittleren Durchmesser von 0,5 m. Wir sehen deutlich, dass sich erwartungsgemäß für alle drei Zerlegungen ein Wahrscheinlichkeitsmaximum um eben jenen vorgegeben Wert abzeichnet. Die Verteilung hat eine Breite von etwa 0,2 m, d.h. die Mehrheit der Blöcke hat einen mittleren Durchmesser von 0,4 bis 0,6 m. Es fällt weiterhin auf, dass die Besetzungswahrscheinlichkeit für größere Durchmesser schnell auf null fällt, während für sehr kleine Durchmesser eine nichtverschwindende Restwahrscheinlichkeit

²Diese Betrachtung gilt für die zufällige Voronoi - Zerlegung selbst. Für die geomechanische Modellierung kann eine Voronoi-Zerlegung selbstverständlich noch zusätzlich mit durchgehenden Rissen zur Abbildung makroskopischer Schichtflächen zwischen verschiedenen Salzvarietäten versehen werden.

³Definiert als Durchmesser eines flächengleichen Kreises

verbleibt. Dabei handelt es sich offensichtlich um diejenigen Blöcke am Modellrand, die durch die Begrenzung quasi „abgeschnitten“ wurden.

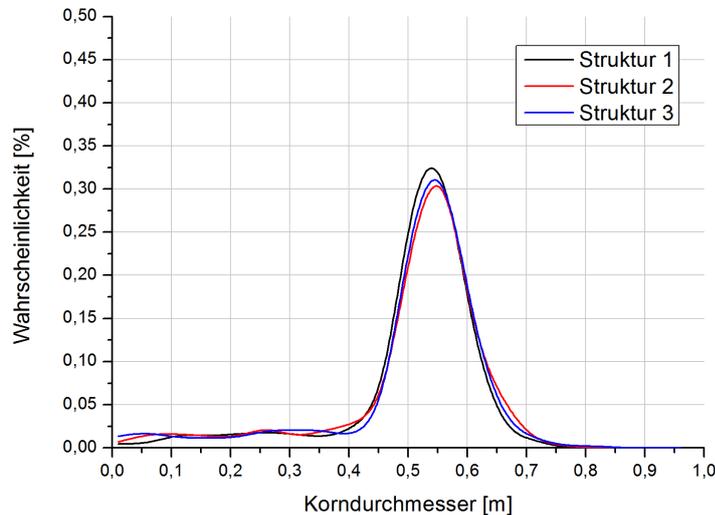


Abb. 4.12: Wahrscheinlichkeitsverteilung der Korndurchmesser in verschiedenen Voronoi-Diskretisierung bei gleichem mittleren Durchmesser.

In einer weiteren Untersuchung wurde die Verteilung des Winkels der Kontaktnormalen mit der y -Achse untersucht (Abb. 4.13, rechts). Dieser Winkel schwankt von 0° (horizontal) bis 90° (vertikal, Kontaktnormalen mit negativer y -Komponente werden entlang der x -Achse gespiegelt) und es galt zu belegen, dass es keine Bevorzugung bestimmter Richtungen gibt. Hierfür wurde erneut ein Histogramm angelegt, in dem die gefundenen Winkel in 18 Segmente (zu je 5°) einsortiert wurden. Im Falle einer völlig zufälligen Verteilung sollte die Wahrscheinlichkeit, einen Winkel in einem bestimmten 5° -Segment zu finden bei $p = \frac{1}{18} \approx 0.055$ liegen. Abb. 4.13 bestätigt diese Annahme für die drei untersuchten Zerlegungen.

Eine interessante Folge dieser Eigenschaft der gleichmäßig verteilten Korngrenzorientierungen polykristalliner Zerlegungen ist, dass im Allgemeinen kein durchgehender Weg auf Korngrenzen entlang eines geradlinigen Pfades existiert. Diese Feststellung und ihre Konsequenzen werden im späteren Abschnitt zur druckgetriebenen Fluidausbreitung im polykristallinen Salzgestein einer genaueren Betrachtung unterzogen. Ohne diesen Erläuterungen vorgreifen zu wollen, gehen wir im Rahmen der strukturellen Analyse in diesem Kapitel noch einen Schritt weiter und untersuchen, wie groß die „mittlere gerade Weglänge“ in Abhängigkeit der Feinheit der Voronoi-Zerlegung ist. Den Begriff „mittlere gerade Weglänge“ definieren wir in unserem Kontext folgendermaßen: Wir suchen die

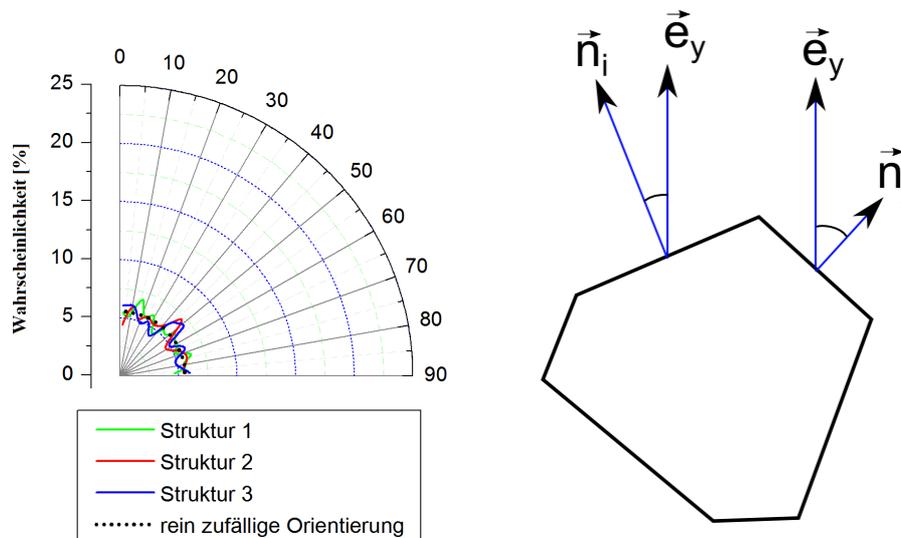


Abb. 4.13: Wahrscheinlichkeitsverteilung der Winkel zwischen y-Achse und Korngrenznormale als Maß für die Verteilung Korngrenzorientierungen.

mittlere Länge eines zusammenhängenden Pfades von Korngrenzen, deren Winkel zur Ausgangskorngrenze maximal 45° beträgt (Abb. 4.14, links). Hierfür wird ausgehend von jeder einzelnen Korngrenze die zugehörige Pfadlänge ermittelt und dann über alle Pfade gemittelt. Es zeigt sich (Abb. 4.14, rechts), dass die mittlere freie Weglänge im Mittel ca. drei Korngrenzdurchmesser beträgt und demnach für feine Voronoi-Diskretisierungen zunehmend kleiner wird. Auch dieser Punkt dient als Fundament für die kritische Betrachtung der druckgetriebenen Fluidperkolation in Kapitel 6 und wird an dieser Stelle zunächst nicht weiter interpretiert.

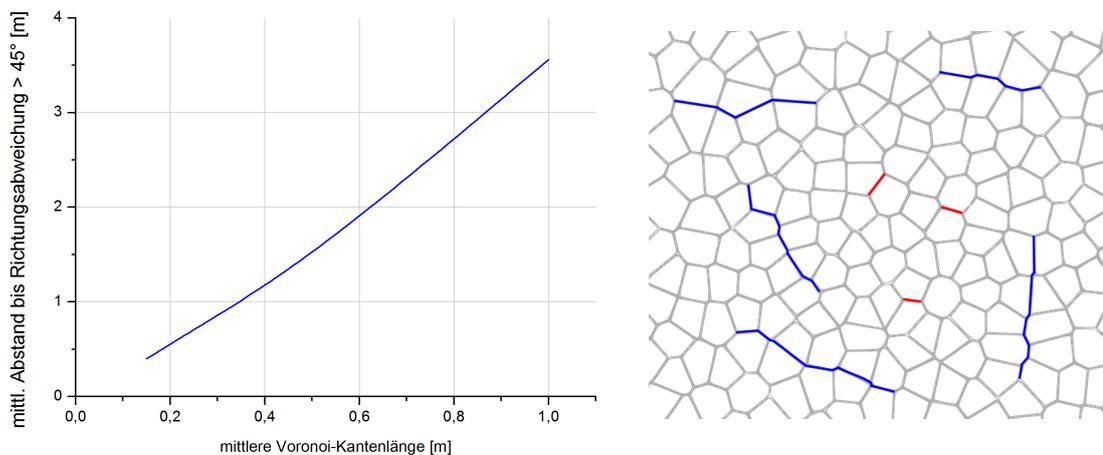


Abb. 4.14: Mittlere freie Weglänge innerhalb einer 2D-Voronoi-Struktur in Abhängigkeit der mittleren Korngröße.

Insgesamt untermauern die dargelegten einfachen statistischen Betrachtungen die prinzipiellen Annahmen, die wir für die Darstellung polykristalliner Festkörper durch Voronoi-Triangulationen unterstellen. Bei zufälliger Punktmenge mit Abstandskriterium entstehen Voronoi-Triangulationen mit vorgegebener mittlerem Korndurchmesser bei mit maximal ca. $\pm 20\%$ Abweichung. Gleichzeitig entsteht eine Korngrenzstruktur mit zufällig verteilten Normalenrichtungen ohne signifikante Bevorzugungen.

Kapitel 5

Entwicklung einer konsistenten Parametrisierungsstrategie

5.1 Makroskopische Eigenschaften als Folge intra- und interkristalliner Wechselwirkungen

In den folgenden Kapiteln wird dargelegt, welche Effekte durch die zusätzliche Diskretisierungsebene der diskontinuumsmechanischen Methode auftreten und wie diese mit der modellierten Blockstruktur korrelieren. Dabei wird häufig eine Unterscheidung zwischen mikroskopischen und makroskopischen Eigenschaften nötig werden, die wie folgt aufgefasst werden: Unter mikroskopischen Eigenschaften werden die für das mechanische Verhalten der deformierbaren Blöcke und ihren Wechselwirkungen angesetzten Materialeigenschaften wie z.B. Elastizitätsmodul oder Normalsteifigkeiten verstanden, während diejenigen Eigenschaften als makroskopisch bezeichnet werden, die sich aus der expliziten Simulation eines Probenkörpers unter bestimmter mechanischer Belastung ergeben.

In konventionellen kontinuumsmechanischen Berechnungen wird das elastische Verhalten durch die Angabe von Kompressions- und Schermodul für die finiten Elemente vollständig bestimmt, sodass die makroskopischen elastischen Eigenschaften eines kontinuumsmechanischen Berechnungsmodells mit den für die numerischen Zonen angesetzten Moduli übereinstimmen. Durch die zweifache Zerlegung des Gesteins in eine Menge deformierbarer Blöcke, die untereinander entlang ihrer Grenzflächen wechselwirken, ergibt sich zwangsläufig, dass die makroskopischen Eigenschaften eines diskontinuumsmechanischen Modells sowohl durch das Verformungsverhalten der Blöcke als auch durch die Normal-

und Schersteifigkeiten der Kontaktflächen bestimmt werden. Für die Modellierung muss daher berücksichtigt werden, dass z.B. die makroskopischen elastischen Moduli deutlich von denen der einzelnen Kristalle abweichen können. Abb. 5.1 verdeutlicht das Zusammenspiel der Wechselwirkungen anhand eines Modells mit parallelen, horizontal orientierten Schichtungen. Die durch eine vertikal wirkende Auflast verursachte elastische Gesamt-

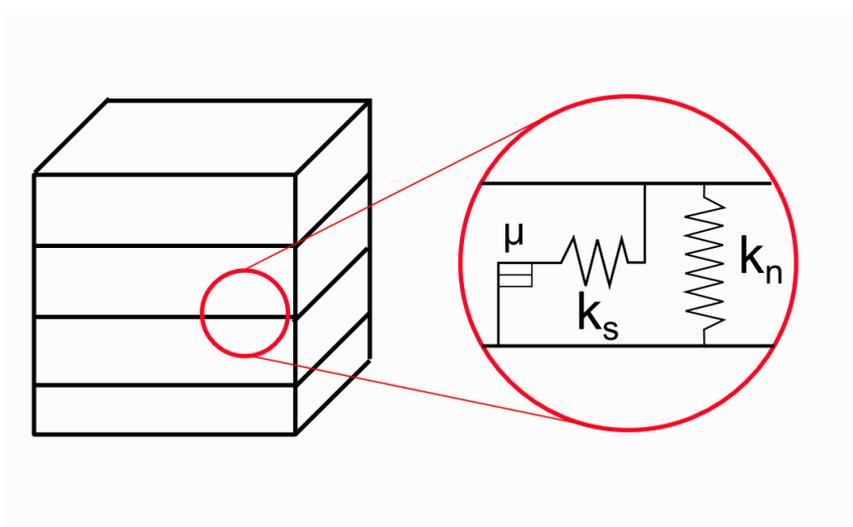


Abb. 5.1: Prinzipskizze zu den Wechselwirkungen entlang von Grenzflächen.

verformung wird sowohl durch die elastische Reaktion der einzelnen Blöcke als auch die Normalsteifigkeiten der Schichtung bestimmt. Für dieses einfache Modell bei einachsialer Belastung lässt sich der makroskopische Kompressionsmodul in z -Richtung $K_{Makro,z}$ durch den mikroskopischen Kompressionsmodul $K_{Mikro,z}$ und die Normalsteifigkeiten der Kontakte k_n sowie deren mittleren Abstand s angeben [50]:

$$\frac{1}{K_{Makro,z}} = \frac{1}{K_{Mikro,z}} + \frac{1}{k_n \cdot s} \quad (5.1)$$

Diese Gleichung ist offensichtlich strukturell analog zu einer Reihenschaltung von Widerständen. Dementsprechend lässt sich das qualitative Systemverhalten aus diesen Relationen leicht ablesen: Im Falle hoher Normalsteifigkeiten oder großer Schichtabstände wird die Verformung durch die elastische Reaktion der Blöcke selbst - und damit durch $K_{Mikro,z}$ - bestimmt. Geringe Normalsteifigkeiten bzw. eine hohe Dichte von Schichtflächen führen jedoch zu einem immer größer werdenden Anteil der interkristallinen Wechselwirkungen, sodass $K_{Makro,z} \ll K_{Mikro,z}$ werden kann.

Eine analoge Beziehung lässt sich für Schermoduli und Steifigkeiten ableiten:

$$\frac{1}{G_{Makro,z}} = \frac{1}{G_{Mikro,z}} + \frac{1}{k_s \cdot s} \quad (5.2)$$

Diese Relationen sind jedoch nur für die in Abb. 5.1 dargestellte Modellgeometrie gültig und für die Modellierung von Voronoi-Elementen mit verschiedensten Orientierungen der Kontaktflächen bestenfalls zur Bestimmung einer groben Größenordnung der Normal- und Schersteifigkeiten geeignet. Beispielsweise lässt sich bereits für ein einfaches Schichtmodell mit leicht geneigten Schichtflächen zeigen, dass der makroskopischen Kompressionsmodul erwartungsgemäß auch von der Schersteifigkeit k_s abhängig ist und im Widerspruch zu Gl. 5.1 nicht alleine durch k_n bestimmt wird.

Es existieren zahlreiche Ansätze zur qualitativen und quantitativen Beschreibung des Effekts von unregelmäßig orientierten Schichtungen auf die makroskopischen Eigenschaften eines Gesteins [59–61]. Idealerweise sollte ein funktionaler Zusammenhang vorliegen, der die Gl. 5.1 und 5.2 um den Einfluss der geometrischen Struktur ergänzt. Eine solche Möglichkeit wird in [62] für den Elastizitätsmodul einer Körpers angegeben, der von n verschiedenen Schichtungen mit Schichtdichte λ durchzogen wird:

$$E_{Makro} = \frac{E_{Mikro}}{1 + E_{Mikro} \cdot \sum_{i=1}^n \lambda_i c_i^2 \left(\frac{c_i^2}{k_n} + \frac{c_i'^2}{k_s} \right)} \quad (5.3)$$

wobei $c_i = -\cos(\beta_i)$ und β_i der Winkel zwischen Schichtflächennormalen und x-y-Ebene ist.

Diese Gleichung lässt sich durch Vorziehen der Normal- und Schersteifigkeiten und Einführung der Variablen α_n und α_s mit

$$\alpha_n = \sum_{i=1}^n \lambda_i c_i^4 \quad (5.4)$$

$$\alpha_s = \sum_{i=1}^n \lambda_i c_i^2 c_i'^2 \quad (5.5)$$

vereinfachen zu:

$$E_{Makro} = \frac{E_{Mikro}}{1 + E_{Mikro} \left(\frac{\alpha_n}{k_n} + \frac{\alpha_s}{k_s} \right)} \quad (5.6)$$

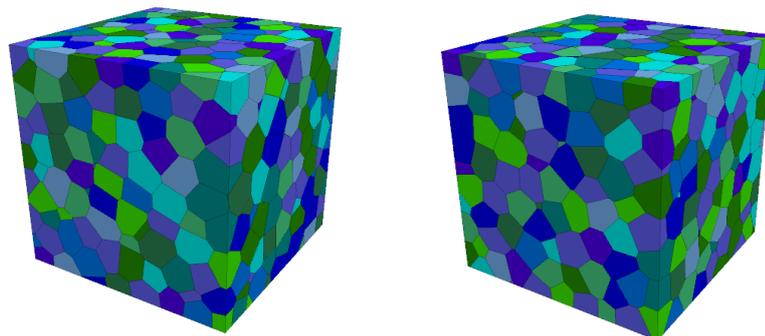


Abb. 5.2: Zwei verschiedene Voronoi-Diskretisierungen bei gleicher mittlerer Korngröße.

Diese Gleichung erfasst nun also die Abhängigkeit des makroskopischen Elastizitätsmoduls von beiden Kontaktsteifigkeiten und dem mikroskopischen Elastizitätsmodul. Die konstanten Parameter α_n und α_s werden dabei ausschließlich durch die Geometrie und Verteilung der Kontaktflächen bestimmt und lassen sich damit beispielsweise aus einer Reihe von einfachen Druckversuchen an diskontinuumsmechanischen Modellen mit Voronoi-Blockstruktur ermitteln.

Zusätzlich zu diesen strukturell motivierten Überlegungen sind auch numerische Gesichtspunkte bezüglich der Wahl von k_n und k_s zu beachten. So werden von Itasca [43] aus Anforderungen an die numerische Stabilität folgende Ober- und Untergrenzen für die Wahl der Steifigkeiten gestellt:

$$\frac{\sigma_N}{0.1 \cdot \Delta z} \lesssim k \lesssim 10.0 \cdot \left[\max \left(\frac{K + \frac{4}{3}G}{\Delta z} \right) \right] \quad (5.7)$$

wobei σ_N die Normalspannung, Δz die kleinste Abmessung der naheliegenden deformierbaren Zonen mit Kompressionsmodul K und Schermodul G ist. Diese Relationen ergeben sich aus der Forderung, dass die Blöcke gegenseitig nicht zu stark überlappen dürfen und die Kontakte gleichzeitig nicht so steif sein dürfen, dass das Modell mit zu starken Fluktuationen und lange anhaltenden Ausgleichsbewegungen reagiert. Die Forderungen unterstreichen damit, dass es sich bei den Normal- und Schersteifigkeiten im diskontinuumsmechanischen Modell primär um Modellgrößen handelt, die u.a. von der Ver Netzungsfeinheit abhängen und somit nicht notwendigerweise den Steifigkeiten entsprechen müssen, die experimentell an makroskopischen Schichtflächen ermittelt werden.

Zur genauen Untersuchung der Einflusses der Normal- und Schersteifigkeiten auf das Gesamtverhalten des Modells wurden zwei würfelförmige Körper (Kantenlänge 10 m, Abb.

5.2) mit unterschiedlichen Voronoi-Zerlegungen bei vergleichbarer mittlerer Blockgröße einer einachsigen Belastung von 10 MPa ausgesetzt. Die Voronoi-Blöcke wurde dabei rein elastisch mit $K_{Mikro}=18$ GPa und $G_{Mikro}=12$ GPa modelliert. Anhand der vertikalen und horizontalen Verformungen im Gleichgewicht wurden somit die entsprechenden makroskopischen Moduli für verschiedene Kombinationen von k_n und k_s berechnet. In Abb. 5.3 (links) wird der Elastizitätsmodul für beide Voronoi-Blockstrukturen in Abhängigkeit der Normalsteifigkeit bei verschiedenen konstanten Schersteifigkeit dargestellt. Die Ergebnisse

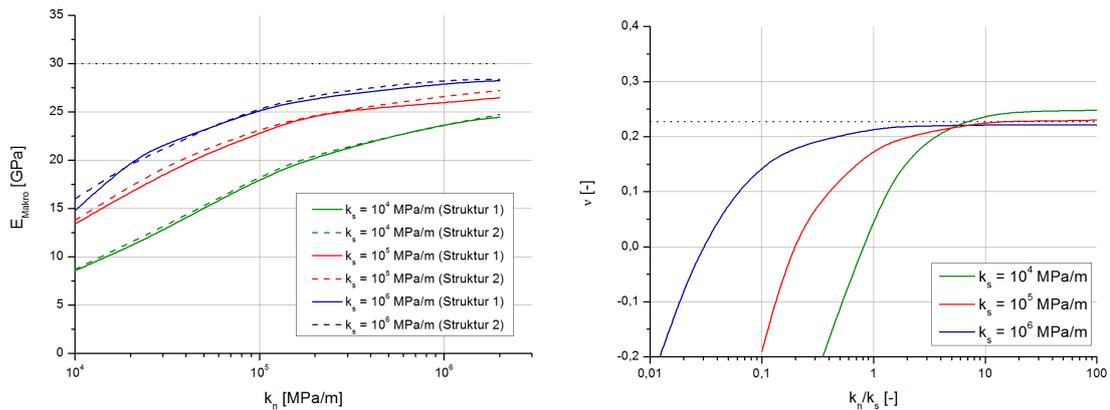


Abb. 5.3: Makroskopischer Elastizitätsmodul (links) und Querdehnungszahl (rechts) in Abhängigkeit der Normal- und Schersteifigkeiten auf den Korngrenzen.

zeigen einerseits die erwartete Annäherung an die mikroskopischen Moduli bei zunehmenden Kontaktsteifigkeiten und sind andererseits völlig unabhängig von der konkreten Voronoi-Zerlegung. Diese Resultate lassen sich dann bei geeigneter Wahl von α_n und α_s durch Gl. 5.6 anpassen, die im Gegensatz zu vereinfachten Ansätzen (Gl. 5.1) gleichzeitig den Einfluss von Scher- und Normalsteifigkeiten berücksichtigt. Damit sind wir also in der Lage, die makroskopische elastische Reaktion eines Voronoi-Blockmodells mit gegebener Geometrie und Parametern für das Verformungsverhalten der Blöcke abzuschätzen und vorherzusagen. Nun besteht im Rahmen der o.g. Anforderungen für numerische Stabilität dennoch scheinbar ein gewisser Freiraum für die Wahl der Kontaktsteifigkeiten. Die Untersuchung der makroskopisch aufgetretenen Querdehnungszahlen in den Simulationen zeigt allerdings, dass nur bei geeigneten Verhältnissen von Normal- zu Schersteifigkeiten physikalisch sinnvolle Querdehnungen beobachtet werden, die dann auch mit den mikroskopischen Zoneneigenschaften übereinstimmen. In Abb. 5.3 (rechts) wird daher die makroskopische Querdehnungszahl erneut bei verschiedenen festen Schersteifigkeiten als Funktion des Verhältnisses $\frac{k_n}{k_s}$ dargestellt. Es wird unmittelbar ersichtlich, dass eine zu-

friedenstellende Übereinstimmung mit der mikroskopisch angesetzten Querdehnungszahl ($\nu = 0.227$) erst ab einem Verhältnis $\frac{k_n}{k_s} \gtrsim 5$ erreicht wird. Wenn die Normalsteifigkeit deutlich unter der Schersteifigkeit liegt, zeigen sich in den Simulationen sogar negative Querdehnungen, d.h. die korrekte Wahl dieses Verhältnisses ist von entscheidender Bedeutung für die korrekte Reproduktion des elastischen Verhaltens der Modelle, die mit der diskontinuumsmechanische Methode modelliert werden.

Insgesamt bestätigen diese Testsimulationen an Voronoi-Probekörpern die eingangs getroffenen Überlegungen zur Wechselwirkung intra- und interkristalliner Eigenschaften und liefern darüber hinaus ein erstes Argument für die Unabhängigkeit der Simulationsergebnisse von der jeweiligen Voronoi-Triangulation.

5.2 Ermittlung elastischer Parameter basierend auf Schallmessungen

In Kapitel 5.1 wurde ausführlich auf die Abhängigkeit der makroskopischen Systemeigenschaften vom mikroskopischen Wechselspiel der intra- und interkristallinen Wechselwirkungen eingegangen. Die elastische Reaktion hängt demnach sowohl von intrakristallinem Elastizitätsmodul und Querdehnungszahl als auch von den Normal- und Schersteifigkeiten entlang der Korngrenzen ab. Die numerischen Studien hatten gezeigt, dass für Normalsteifigkeiten k_N nahe der numerischen Obergrenze aus Gl. 5.7 bei $\frac{k_N}{k_s} \gtrsim 5$ das elastische Verhalten der Kristallmatrix dominiert (Abb. 5.4, links) und die entsprechenden Elastizitätskonstanten gemäß der elastischen Eigenschaften der Voronoi-Blöcke reproduziert werden. Die Korngrenzen würden unter diesen Bedingungen bei hohen Steifigkeiten also nicht mehr signifikant zum elastischen Verformungsprozess beitragen ¹.

Da das Verformungsverhalten auch im realen Salzgestein im Zusammenspiel von intra- und interkristallinen Anteilen geschieht, stellt sich also die Frage, inwieweit die elastische Reaktion auch im echten Prüfkörper von der Kristallmatrix dominiert wird, oder ob wir in der Modellierung auch einen deutlicheren Einfluss durch „weichere“ Kontaktsteifigkeiten berücksichtigen müssten.

¹Das Konzept der Schädigungsentwicklung auf Korngrenzen als intrinsisches Schwächeflächennetzwerk bleibt hiervon unbeeinflusst, da hier lediglich der elastische Verformungsanteil der Korngrenzen im ungeschädigten Zustand diskutiert wird.

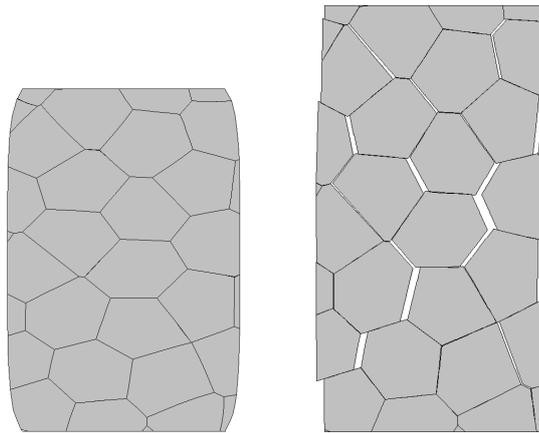


Abb. 5.4: Kristalldominierte (links) und korngrenzdominierte (rechts) Verformung.

Um die tatsächliche relative Wichtung der intra- und interkristallinen Anteile am Verformungsprozess zu erfassen, können wir weitere Laborversuche zur Eichung heranziehen. Neben der klassischen Ermittlung elastischer Parameter aus den Be- und Entlastungsschleifen von Druckversuchen, hat sich die Methode der Ultraschallmessung in der experimentellen Gesteinsmechanik etabliert [63]. Da dieser Ansatz auf der Charakterisierung der Wellenausbreitung im Gestein basiert, erscheint er als besonders geeignet, die elastischen Kristallwechselwirkungen zu parametrisieren.

Die Methode basiert auf der Laufzeitmessung von Ultraschallwellen durch die Gesteinsprobe, d.h. der benötigten Zeit der Schallausbreitung vom Signalgeber bis zum Messaufnehmer, wobei die Ausbreitung von Longitudinal- und Transversalwellen betrachtet wird (Abb. 5.5). Aus den zugehörigen Geschwindigkeiten v_p und v_s lassen sich Kompressions- und Schermodul bestimmen:

$$v_p = \sqrt{\frac{K + \frac{4}{3}G}{\rho}} \quad (5.8)$$

$$v_s = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (5.9)$$

Für ungeschädigte, polykristalline Steinsalzprüfkörper liegen die gemessenen Geschwindigkeiten in etwa bei $v_p = 4500 \frac{m}{s}$ und $v_s = 2500 \frac{m}{s}$ und nehmen bei zunehmender Einspannung leicht zu, bedingt durch Schließung von vorhandenem Porenraum und allgemeiner Matrixkompaktion. Unter fortschreitender Schädigung hingegen erhöhen sich jedoch die Laufzeiten, wodurch diese Messmethode auch zur Charakterisierung des Schä-

digungsverlaufes bei triaxialer Belastung verwendet wird [29, 64]. Die verschiedenen Geschwindigkeiten reagieren darüber hinaus unterschiedlich sensitiv auf die Art der Schädigung, d.h. kompressive oder extensive Belastung.

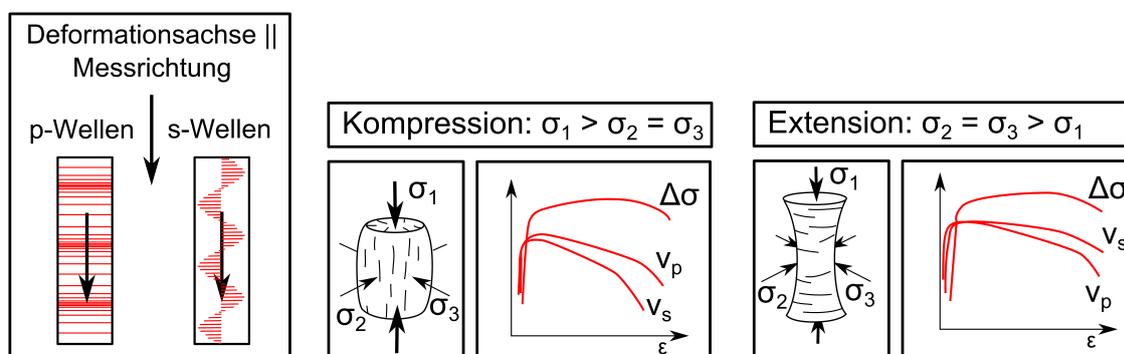


Abb. 5.5: Prinzip der Schallmessungen und Abhängigkeit der Schallgeschwindigkeiten unter verschiedenen Deformationsformen.

Aus Literaturwerten der elastischen Eigenschaften von Steinsalz-Einkristallen [65] lässt sich aus Gl. (5.8 und 5.9) auch zum Vergleich die Schallgeschwindigkeiten der Kristallmatrix selbst ermitteln. Die damit ermittelten Werte liegen (im drucklosen Zustand und bei $T = 300 \text{ K}$) ebenfalls bei Werten von $v_p \approx 4500 \text{ m/s}$ und $v_s \approx 2600 \text{ m/s}$, d.h. also nahe der Werte, die auch an polykristallinen Steinsalzproben gemessen werden. Alternative Messungen an Einzelkristallen bestätigen diese Abschätzungen [66]. Damit kann die Schlussfolgerung gezogen werden, dass die Korngrenzen der realen Probe in der elastischen Reaktion keine deutliche Verzögerung der Schallwellen verursachen und daher auch das gesamte elastische Verhalten des ungeschädigten Materials eher von der Kristallmatrix bestimmt wird. Demnach könnten wir für unsere nachfolgenden Validierungsrechnungen und Anwendungsstudien mit den groben Parametrisierungsrichtlinien

$$k_N \approx 10.0 \cdot \left[\max \left(\frac{K + \frac{4}{3}G}{\Delta z} \right) \right] \quad (5.10)$$

$$\frac{k_N}{k_S} \geq 5 \quad (5.11)$$

arbeiten, sofern die numerischen Stabilitätskriterien (Gl. 5.7) keine Anpassung erfordern. Hierzu ist ergänzend zu erwähnen, dass sehr hohe Steifigkeiten i.A. im Programmcode zu Instabilität neigen, da bereits kleine Verschiebungsschwankungen im Rahmen der numerischen Ungenauigkeit der Finite-Difference-Methode zu großen (künstlichen) Span-

nungsspitzen führen können. Demnach ist modellspezifisch abzuwägen, ob gegebenenfalls etwas geringere Steifigkeiten verwendet werden können, um auf Kosten kleiner Abweichungen der Elastizität im Gegenzug viel numerische Stabilität zu gewinnen.

Ergänzend zu diesen Überlegungen wurde ein Durchschallversuch in einem diskontinuumsmechanischen Modell für einen zylinderförmigen Prüfkörper (mit einem Verhältnis Breite : Höhe von 1 : 2) modelliert (Abb. 5.6), wie er in Kapitel 7 im Rahmen der vergleichenden Validierung mit Laborversuchen verwendet werden wird. Im Hinblick auf die Modellierung großräumiger Strukturen wurde die Probe mit einer Größe von 12 m und einem Durchmesser von 6 m dargestellt. Der mittlere Voronoi-Durchmesser beträgt etwa 1 m und die interne Vernetzung wird mit einer maximalen Kantenlänge von 0,3 m vorgenommen. Im ungeschädigten Zustand wurde jeweils eine sinusförmige Geschwindigkeitsrandbedingung der z - bzw. x -Komponente ausgesetzt, um die p - und s -Wellen nachzubilden. Hierfür wurde die Schwingung am oberen Probenende in Anlehnung zu realen Schallversuchen [63] mit einer Anregungsfrequenz von 1 kHz angesetzt und die Laufzeit der induzierten Welle bis zum unteren Ende des Prüfkörpers gemessen. Zur Modellierung dynamischer Vorgänge müssen Dämpfung und Massenskalierung, die zur beschleunigten Konvergenz quasi-statischer Simulationen beitragen, abgeschaltet werden, da sie die Wellenausbreitung sonst verfälschen würden. Für die korrekte Abbildung der Wellendynamik von p - und s -Wellen werden aus numerischer Sicht ebenfalls Bedingungen an den maximalen Gitterpunkt Abstand $h_{p/s}$ gestellt (Gl. (5.12) und (5.13)),

$$h_p \lesssim 10 \cdot \frac{v_p}{f} = 10 \cdot \frac{1}{f} \sqrt{\frac{K + \frac{4}{3}G}{\rho}} \quad (5.12)$$

$$h_s \lesssim 10 \cdot \frac{v_s}{f} = 10 \cdot \frac{1}{f} \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (5.13)$$

wobei

- $v_{p,s}$ die Schallgeschwindigkeit von p - und s -Welle
- K der Kompressions- und G der Schermodul
- ν die Querdehnungszahl
- ρ die Materialdichte

- f die Frequenz der Welle

darstellen. Unter Berücksichtigung der in Tabelle 5.1 zusammengestellten Materialpara-

Tab. 5.1: Materialparameter der Durchschallungssimulation eines Voronoi-Probekörpers.

Zoneneigenschaften			
<i>Elastisches Stoffmodell</i>			
Kompressionsmodul K [GPa]	25	Schermodul G [GPa]	15
Dichte [kg/m^3]	2160		
Schichtflächeneigenschaften			
<i>Mohr-Coulomb Modell</i>			
Normalsteifigkeit k_N [GPa/m]	10	Kohäsion [MPa]	6
Schersteifigkeit k_S [GPa/m]	2	Restkohäsion [MPa]	0
Reibungswinkel [\angle]	30	Zugfestigkeit [MPa]	4
Restreibungswinkel [\angle]	15	Restzugfestigkeit [MPa]	0

meter für den Durchschallungsversuch lässt sich unmittelbar erkennen, dass beide Bedingungen sicher erfüllt sind. Die Festigkeitsparameter der Korngrenzen sind in diesem Fall irrelevant, da der geringe Schallimpuls keine Schädigungen induziert. Anhand des vorgestellten Versuchsablaufes wurden letztendlich in der Simulation Schallgeschwindigkeiten von $v_p = 4400$ m/s und $v_s = 2400$ m/s gemessen, was in guter Übereinstimmung mit den Erwartungen steht und das elastische Verhalten der diskontinuumsmechanisch modellierten Gesteine zusätzlich validiert.

5.3 Strategie zur Ermittlung der Festigkeitsparameter für Salzkristalle und Korngrenzen

Für die diskontinuumsmechanische Simulation wird die zu modellierende Probengeometrie mittels der in Kap. 4.3 vorgestellten Methodik durch eine dreidimensionale Voronoi-Blockstruktur dargestellt, für deren intra- und interkristalline Wechselwirkungen nun eine Parametrisierung nötig ist, die sich möglichst auf nachvollziehbare und konsistente Art und Weise aus Laborergebnissen und in-situ Messungen ergibt.

Wie wir bereits in der Diskretisierungsstudie des vorherigen Abschnittes gesehen haben, kann ein einfacher, sehr spröder Bruchprozess bereits mit elementaren Stoffmodellen

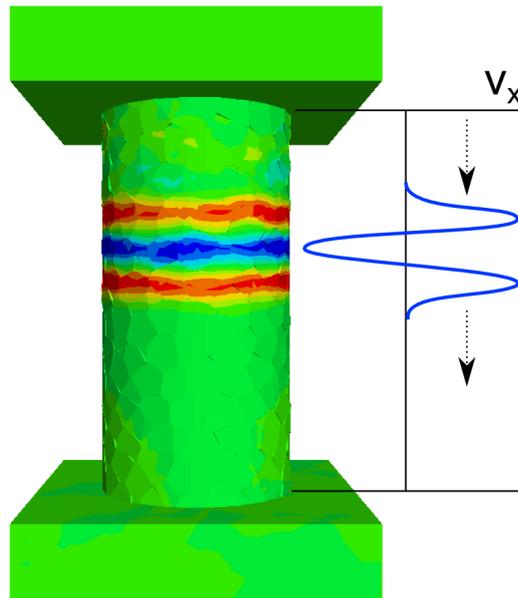


Abb. 5.6: Qualitative Darstellung der x-Geschwindigkeitskomponente während einer Durchschallungssimulation (s-Welle). Anregung erfolgte am oberen Druckstempel.

abgebildet werden. Das Verhalten von Steinsalz ist jedoch mit seinen ausgeprägten Bereichen der plastischen Ver- und Entfestigung sowie dem Kriechen deutlich komplexer. Die Modellierung muss in der Lage sein, all diese Effekte innerhalb einer konsistenten Formulierung mit angemessenen Stoffmodellen abzubilden.

Prinzipiell wird für diesen Modellierungsansatz folgende Annahme getroffen, die für die nachfolgende Parameterwahl von entscheidender Bedeutung ist: Während die Kristallmatrix – und damit die intra-kristallinen Eigenschaften – die Verfestigung des Materials beschreibt, läuft die Entfestigung ausschließlich über Scher- und Zugversagen entlang der Korngrenzen ab. Für das Verhalten der Kristalle selbst wird also lediglich eine von der plastischen Verformung abhängige Verfestigung bis zu einer einhüllenden Maximalfestigkeit verwendet, auf die im Unterschied zur konventionellen kontinuumsmechanischen Behandlung keine Entfestigung folgt. Vielmehr wird durch die zunehmende Verfestigung der Kristalle immer mehr Last auf die Korngrenzen verteilt, die letztendlich abscheren und z.B. den Prüfkörper spröde oder duktil versagen lassen.

Ausgehend von diesem Ansatz müssen dann die Festigkeits- und Verformungseigenschaften entlang der Korngrenzen in ihrem Zusammenspiel mit den entsprechenden Eigenschaften der Kristallmatrix ermittelt werden. In experimentellen Untersuchungen werden Scherfestigkeiten typischerweise an makroskopischen Grenzflächen zwischen unterschied-

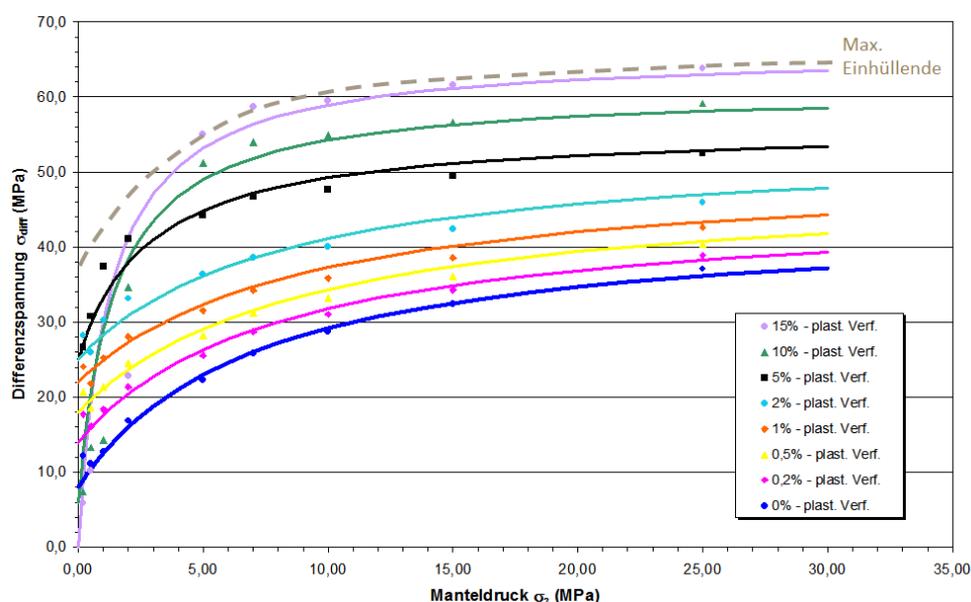


Abb. 5.7: Einhüllende Festigkeitskurve zur Ableitung der diskontinuumsmechanischen Scherfestigkeiten an Korngrenzen.

lichen Gesteinen untersucht, da diese sich als Schwächeflächen darstellen, entlang derer das Scherversagen bevorzugt stattfindet. Auch in Scherversuchen an Probenkörpern, die nur aus Steinsalz bestehen, sind Vorzugszonen des Scherversagens entlang von Übergängen zwischen grob- und feinkristallinen Bereichen zu beobachten. Demzufolge eignen sich diese Versuche nur bedingt, um aus ihnen die Schereigenschaften der Korngrenzen abzuleiten, die sich direkt kaum experimentell messen lassen werden. Um die Scherfestigkeiten für die diskontinuumsmechanische Modellierung dennoch auf einem belastbaren und nachvollziehbaren Wege ermitteln zu können, wird ein Weg gewählt, der die Scherparameter aus experimentell ermittelten Festigkeiten über elementare Relationen der Festkörpertheorie ansetzt.

In Abb. 5.7 sind die Festigkeitskurven aus triaxialen Druckversuche an Steinsalz zusammengestellt, aus denen sich die notwendigen Parameter ableiten lassen. Für geringe Einspannungen ist die zunehmende Verfestigung und darauffolgende Entfestigung bei ansteigender plastischer Verformung deutlich erkennbar. Für die diskontinuumsmechanische Simulation verwenden wir lediglich die verfestigenden Bereiche bis hin zur einhüllenden maximalen Tragfähigkeit. Diese Kurven sind dann direkte Eingabeparameter in das elasto-visko-plastische Stoffmodell (Vgl. Kap. 4.2.1).

Basierend auf der einhüllenden Festigkeitskurve wird nun die Scherfestigkeit der Korngrenzen basierend auf [67] abgeleitet. Ausgehend von der Bruchfestigkeit $\sigma_{1,B} =$

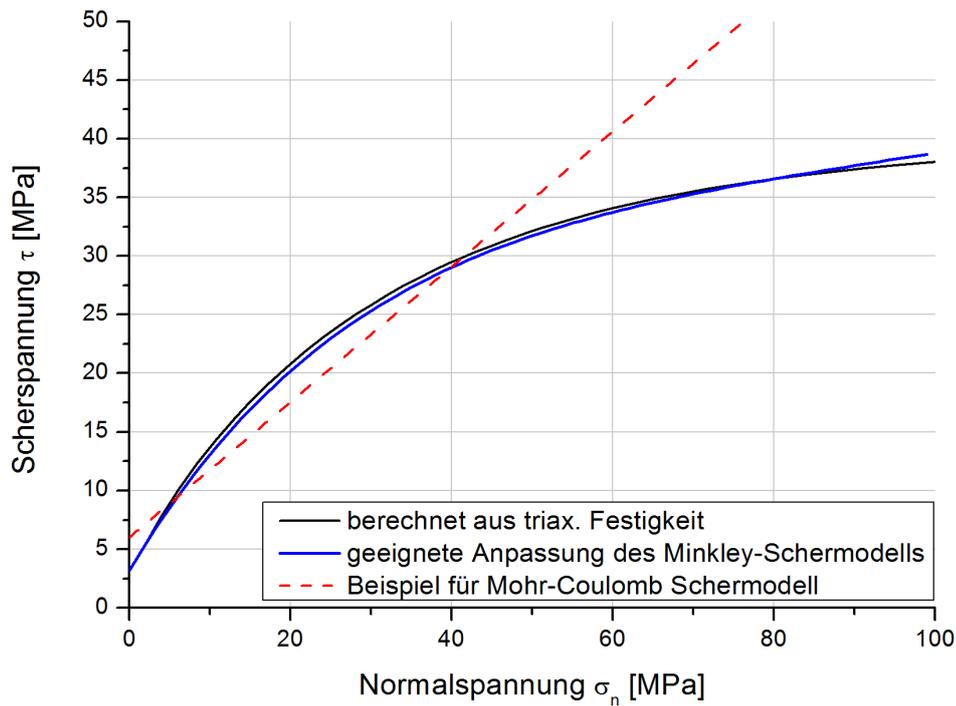


Abb. 5.8: Ermittlung der Scherfestigkeit der Korngrenzen aus triaxialen Festigkeiten und Anpassung des Schermodells.

$f(\sigma_3)$ in Abhängigkeit der minimalen Hauptspannung und der Ableitung $\sigma'_1 = \frac{\partial \sigma_1}{\partial \sigma_3}$ ergibt sich für die maximale Scherfestigkeit

$$\tau_{max} = \frac{(\sigma_1 - \sigma_3) \cdot \sqrt{\sigma'_1}}{1 + \sigma'_1} \quad (5.14)$$

bei zugehöriger Normalspannung

$$\sigma_N = \frac{\sigma_1 + \sigma_3 \cdot \sigma'_1}{1 + \sigma'_1} \quad (5.15)$$

Für das elasto-visko-plastische Stoffmodell lässt sich damit also basierend auf der Festigkeit

$$\sigma_{1,B} = \sigma_D + \left(1 + \frac{\sigma_{Max} - \sigma_D}{\sigma_\phi + \sigma_3}\right) \cdot \sigma_3 \quad (5.16)$$

und der Ableitung

$$\sigma'_{1,B} = 1 + \left[\frac{(\sigma_{Max} - \sigma_D) \cdot \sigma_\phi}{(\sigma_\phi + \sigma_3)^2} \right] \quad (5.17)$$

die zugehörigen $\tau - \sigma_N$ -Paarungen der Scherfestigkeit ermitteln.

In einem letzten Schritt wird die auf diese Weise ermittelte Scherfestigkeitskurve dann durch eine geeignete Parametrisierung des nichtlinearen Schermodells (Vgl. Kap. 4.2.2) angepasst und so mit hoher Genauigkeit im diskontinuumsmechanischen Modell umgesetzt, was bei der Verwendung eines einfachen linearen Mohr-Coulomb Schermodells aufgrund der hochgradigen Nichtlinearität nicht möglich wäre (Abb. 5.8).

Die auf diese Weise gewonnenen Parameter für die Festigkeiten der Korngrenzen liefern eine gute Ausgangsbasis für einen nachvollziehbar abgeleiteten Datensatz. Dennoch sollte der jeweilige Datensatz danach sorgfältig durch die Nachrechnung von Laborversuchen validiert werden. Dies gilt insbesondere aufgrund der vielfältigen Möglichkeiten der Parameterwahl im verwendeten Schermodell, wodurch zwei verschiedene Parametersätze zwar die gleiche Maximalfestigkeit beschreiben können, aber gleichzeitig möglicherweise ein völlig unterschiedliches Entfestigungsverhalten aufweisen. Da es im diskontinuumsmechanischen Modell keine einzelne „entscheidende“ Schichtfläche gibt, die unter bestimmten Bedingungen versagt, sondern der Schädigungsprozess explizit als eine Akkumulation von Korngrenzversagenszuständen bei verschiedenen Zeitpunkten und Spannungszuständen abgebildet wird, wird diese komplexe Wechselwirkung auch entscheidend vom individuellen Entfestigungsverhalten jeder einzelnen Kontaktfläche und der Ansammlung von Versagenszuständen bestimmt. Die in diesem Abschnitt abgeleitete Parametrisierung bildet also eine solide Grundlage für die Modellierung, die dann im Zusammenspiel mit sinnvollen Entfestigungseigenschaften des Schermodells anhand der Nachrechnung von Laborversuchen verfeinert werden sollte.

5.4 Mikroskopische und makroskopische Zugfestigkeit

Die vorgestellte Parametrisierungsmethodik liefert einen Ansatz zur Festlegung der normalspannungsabhängigen Scherfestigkeit, d.h. es muss noch zusätzliche eine Festlegung der Zugfestigkeit σ_T^{Mikro} auf den Korngrenzen erfolgen. In [68] wurde an der Simulation von Spaltzugversuchen bereits festgestellt, dass die modellierte makroskopisch beobachtete Zugfestigkeit σ_T^{Makro} geringer ausfällt, als die auf den Korngrenzen angesetzte Zugfestigkeit, wobei ein ungefähres Verhältnis von $\frac{\sigma_T^{Mikro}}{\sigma_T^{Makro}} \approx 2$ bestand.

Diese Beobachtung soll zunächst an der Nachrechnung direkter Zugversuche an den beiden würfelförmigen Voronoi-Modellkörpern aus Kapitel 5.1 überprüft werden. Die Prüfkörper werden am unteren Ende fixiert und eine Deckplatte fest auf den oberen Modell-

rand geklebt. Nachfolgend wird auf der Deckplatte solange eine schrittweise ansteigende Zugspannung aufgebracht, bis sich das Zugversagen einstellt (Abb. 5.9). Die Matrix wurde rein elastisch mit $K=24$ MPa und $G=14$ MPa modelliert. Die verwendeten Modellparameter für die Korngrenzen sind in Tabelle 5.2 zusammengestellt. Am relevantesten ist hierbei die angesetzte Zugfestigkeit der Korngrenzen von $\sigma_T^{Mikro} = 1$ MPa.

Tab. 5.2: Schermodellparameter der Korngrenzen für die ergänzenden Untersuchungen zur mikroskopischen und makroskopischen Zugfestigkeit.

Schermodellparameter	
Normalsteifigkeit k_N [MPa/m]	10^5
Schersteifigkeit k_S [MPa/m]	$2 \cdot 10^4$
Krümmungsparameter K_1	0,02
Krümmungsparameter K_2	0,02
Kontaktfestigkeit σ_K [MPa]	1
Restreibungswinkel Φ_R [°]	15
Aufgleitwinkel i_0 [°]	10
Entfestigungsdistanz L_1 [m]	0,01
Rauhigkeit L_2 [m]	0,01
Max. Diff. Reibungskoeff. $\Delta\mu_{Max}$	2,3
Krit. Scherverschiebungsgeschw. v_k	10^{-30}
Geschwindigkeitsfaktor b	1,2
Kohäsion c [MPa]	5,5
Zugfestigkeit σ_Z [MPa]	1

Durch die Verwendung zweier verschiedener Voronoi-Diskretisierung wird gleichzeitig deren Einfluss auf das Berechnungsergebnis untersucht. Darüber hinaus soll durch die Variation des Verhältnisses zwischen mittlerem Voronoi-Durchmesser l_V und der internen Vernetzungslänge l_Z eine Beobachtung aus [69] überprüft werden: Dort hatte sich in der 2D-Simulation von Compact-Tension-Tests [70] gezeigt, dass ein nahezu vernetzungsunabhängiges Ergebnis erst ab $l_V/l_Z \gtrsim 2$ einstellte und also bei sehr grober Vernetzung ($l_V/l_Z \approx 1$) eine leichte Überschätzung (20%) der makroskopischen Zugfestigkeit beobachtet wurde.

Abb. 5.9 zeigt das Ergebnis der direkten Zugversuche für verschiedene Voronoi-Diskretisierung und Vernetzungsverhältnisse. Es bestätigt sich zunächst die Beobachtung aus [68], dass im Allgemeinen eine makroskopische Zugfestigkeit beobachtet wird, die etwa um den Faktor 2 unter der angesetzten Korngrenzzugfestigkeit liegt. Dieser Faktor ist

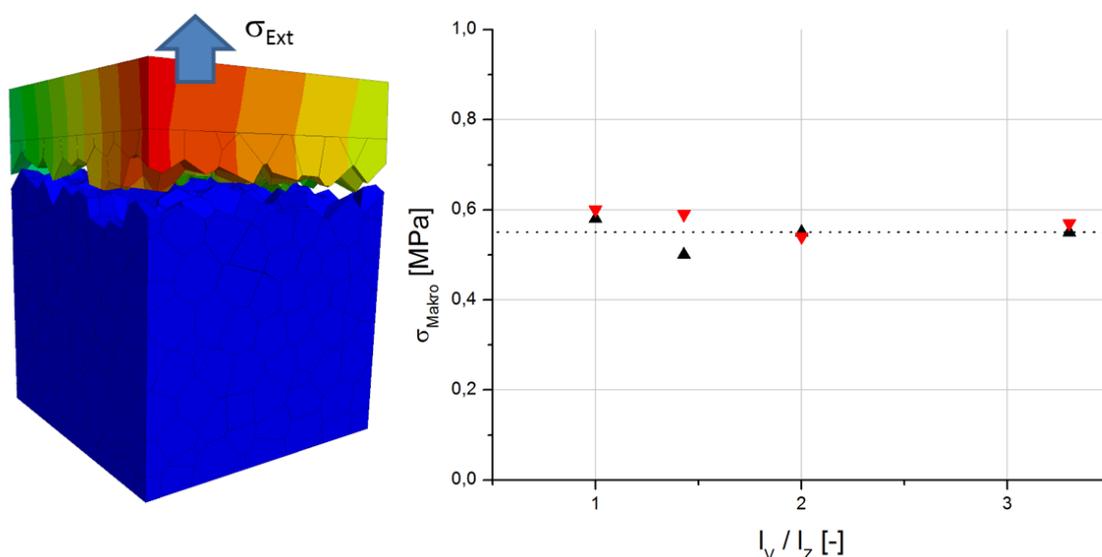


Abb. 5.9: Simulation direkter Zugversuche an würfelförmigen Voronoi-Körnern. Abhängigkeit der makroskopischen Zugfestigkeit σ_T^{Makro} von der angesetzten Zugfestigkeit σ_T^{Mikro} auf den Korngrenzen.

also auch bei der Parametrisierung diskontinuumsmechanischer Modelle von Salzsteinen zu berücksichtigen.

Eine signifikante Abhängigkeit von der Vernetzungseinheit der Voronoi-Kristalle selbst konnte im direkten Zugversuch allerdings nicht festgestellt werden. Daher wurde zusätzlich auch noch der Compact-Tension-Test aus [69] nachgerechnet. Eine quadratische Scheibe aus Voronoi-Elementen wird mit einem vorgeprägten Riss bis in die Prüfkörpermitte versehen und nachfolgend am oberen und unteren Modellrand mit einer ansteigenden Zugspannung versehen. Aufgrund der vorgeprägten Rissfläche konzentriert sich die Schädigungsentwicklung stark auf die Risspitze und die Zugspannung bei Prüfkörperversagen liegt deutlich unter der Zugfestigkeit der Korngrenzen, weshalb in Abb. 5.10 das Verhältnis von extern aufgebrachtener Zugspannung σ_T^{Ext} und σ_T^{Mikro} dargestellt wird.

In diesem Versuch bestätigt sich dann eine leichte Abhängigkeit der makroskopischen Zugfestigkeit von der Vernetzungseinheit, wenn ($l_V / l_Z < 2$), allerdings fällt der Einfluss mit maximal 10% etwas geringer aus, als in [69]. Der Compact-Tension-Test scheint also aufgrund seiner konzentrierten Wirkung auf die Risspitze empfindlicher gegenüber kleinen Abweichungen im Spannungs- und Verformungsfeld zu sein. Trotz des – insbesondere in Bezug auf Absolutwerte – insgesamt eher geringen Einflusses wird in allen nachfolgenden Modellierungen stets ein minimales Verhältnis von $l_V / l_Z \gtrsim 2$ eingehalten und Vernetzungseffekte zu minimieren.

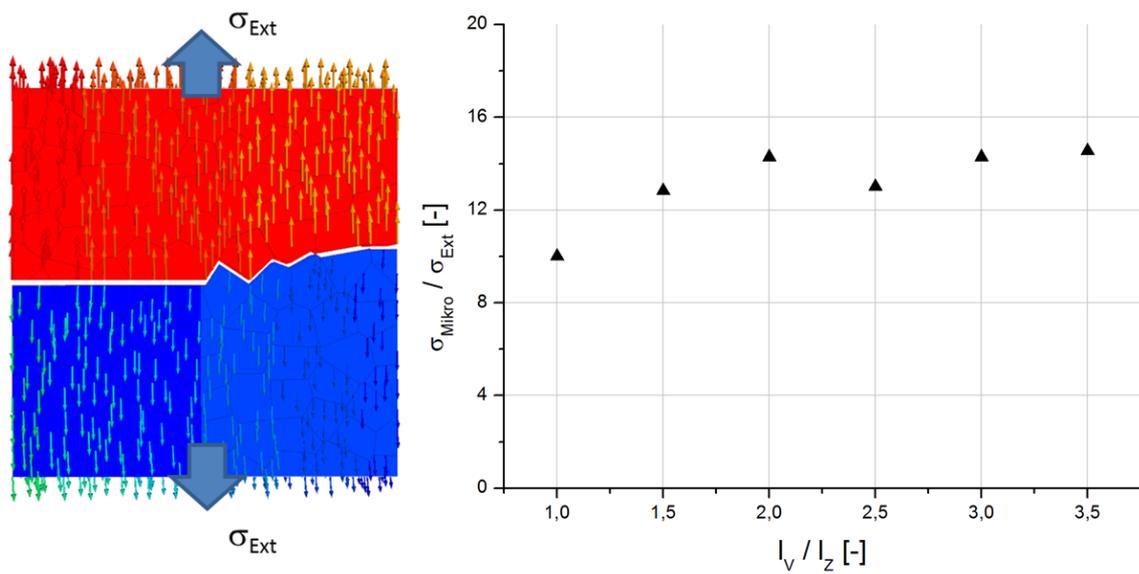


Abb. 5.10: Vernetzungsabhängigkeit des Ergebnisses bei Simulation eines Compact-Tension-Tests.

Der interessierte Leser sei an dieser Stelle auf [71] verwiesen, wo im Rahmen von Untersuchungen zur Rissentwicklung in spröden Materialien durch quellenden Zement ausführlichere und tiefergehende Modellierungen zum Verhalten von diskontinuumsmechanisch modellierten Compact-Tension-Tests durchgeführt worden sind.

Kapitel 6

Hydro-mechanische Beanspruchung und Perkolation

Die Betrachtungen zum Verhalten von Salzgestein unter hydraulischer Beanspruchung in Kap. 2.3 haben gezeigt, dass die Ausbreitung von Flüssigkeiten und Gasen überwiegend durch die Öffnung und Vernetzung von Fließwegen nach Überschreitung einer Perkolationsschwelle auf den Korngrenzen geschieht.

Im diskontinuumsmechanischen Modell sind wir aufgrund der expliziten Simulation der Korngrenzen in der Lage, diesen Prozess abzubilden. Da es jedoch i.A. rechentechnisch nicht möglich sein wird, eine Voronoi-Zerlegung in der Feinheit der realen Salzkristalle zu simulieren, sind einige Anpassungen im Berechnungsablauf zu berücksichtigen, um die Dynamik und Ausbreitungsgeschwindigkeit des Perkolationsprozesses auch in einem gröber vernetzten Modell korrekt reproduzieren zu können. Im nachfolgenden Abschnitt wird die Entwicklung der Modellierungsstrategie für perkolative Prozesse im diskontinuumsmechanischen Ansatz ausgehend von einfachen Einzelschichtmodellen bis hin zu komplexen Strukturen unter variablen Belastungsbedingungen vorgestellt. Aufgrund eines konzeptionellen Unterschiedes in der Fluid-Logik der Rechencodes UDEC und 3DEC, dessen Ausmaß an späterer Stelle ersichtlich wird, müssen die Untersuchungen jeweils getrennt für beide Programme durchgeführt werden.

6.1 Darcy-Strömung und Perkolationstheorie

Die Fluidodynamik ist ein äußerst komplexes Themengebiet, in dem i. A. nur für spezielle Sonderfälle geschlossene Lösungen angegeben werden können, weshalb numerische Näherungslösungen aus Computersimulationen auch für diesen Zweig der Physik ein beliebtes Hilfsmittel sind. Für die geomechanisch relevanten Perkulationsprozesse können wir uns mit der sogenannten „Darcy-Strömung“ jedoch auf einen einfachen Spezialfall zurückziehen, womit die Fluidberechnungen deutlich vereinfacht werden.

In Durchströmungsversuchen an porösen Medien beobachtete Darcy eine Proportionalität des Volumenstromes \vec{Q} zum anliegenden Druckgradienten $\vec{\nabla}p$:

$$\vec{Q} = -\frac{kA}{\mu_{Fluid}} \vec{\nabla}p \quad (6.1)$$

wobei μ_{Fluid} die dynamische Viskosität des Fluids und A die durchströmte Fläche ist. Der Proportionalitätsfaktor k , der also die Durchlässigkeit des Material charakterisiert, wird als Permeabilität bezeichnet. Diese experimentelle Beobachtung konnte später auch theoretisch aus den Navier-Stokes-Gleichungen für die laminare Strömung in speziellen Geometrien abgeleitet werden. Für den Fall der eindimensionalen Strömung eines inkompressiblen Fluids zwischen zwei parallelen Platten im Abstand w (Abb. 6.1) folgt demnach [72]:

$$Q = -\frac{b \cdot w^3}{12\mu_{Fluid}} \frac{\delta p}{\delta x} \quad (6.2)$$

Relation (6.2) wird aufgrund der Abhängigkeit von der dritten Potenz der Spaltöffnungsweite w auch als „cubic law“ bezeichnet. Unter Berücksichtigung der Querschnittsfläche $A = b \cdot w$ folgt aus dem Vergleich von (6.1) und (6.2) für die Permeabilität der Spaltöffnung unmittelbar:

$$k = \frac{w^2}{12} \quad (6.3)$$

Unter der Annahme, dass die mechanisch- oder hydraulisch-induziert geöffneten Korn-grenzflächen jeweils näherungsweise einen derartigen planaren Spalt bilden, kann die Gleichung (6.2) für die hydro-mechanisch gekoppelten Berechnungen verwendet werden. Die Gültigkeit dieser Annahme wurde in experimentellen Untersuchung an Rissstrukturen in verschiedenen Gesteinen bestätigt [73].

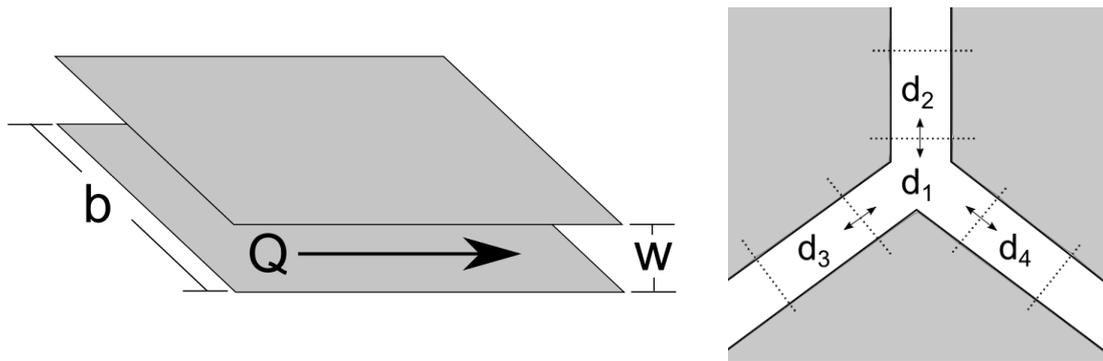


Abb. 6.1: Spaltströmung zwischen parallelen Platten (links) und Struktur der Fluidomänen in UDEC (rechts).

Numerische Umsetzung

Im Rahmen der Rechencodes UDEC und 3DEC wird die Spaltströmung unter Verwendung der *cubic law* explizit modelliert. Hierfür sind die Kontaktflächen zwischen den diskontinuierlichen Blöcken zusätzlich in Fluidomänen (UDEC) bzw. Fluidebenen, -röhren und -knoten (3DEC) diskretisiert. Im zweidimensionalen Fall von UDEC bedeutet dies schlichtweg, dass jeweils die von Blockkontakten umschlossenen Bereiche eine Fluidomäne mit konstantem Druck darstellen (Abb. 6.1, rechts). Die Strömungsberechnung wird dann bezüglich der Öffnungsweite der anliegenden Kontakte und den daraus folgenden Volumenströmen durchgeführt, d.h. für Domäne d_i mit Volumen V wird der neue Druck im nächsten Zeitpunkt $t + \Delta t$ bestimmt durch:

$$p(d_i, t) \longrightarrow p(d_i, t + \Delta t) + \underbrace{K \cdot \frac{q \cdot \Delta t}{V}}_{(1)} - \underbrace{K \frac{\Delta V}{V}}_{(2)} \quad (6.4)$$

wobei

$$q = \sum_j q_j \quad (6.5)$$

die Summe der Fließraten durch alle anliegenden Kontakte darstellt und K der Kompressionsmodul der Flüssigkeit ist. Term (1) beschreibt dabei die Druckänderung durch das ein- bzw. ausfließende Fluid, während (2) die Reaktion auf die mechanische Kompression/Expansion darstellt.

Aufgrund der hohen Kompressibilität von Gasen kann für diese Stoffe die Ableitung der Druckberechnung nicht in analoger Art und Weise erfolgen, da der Kompressionsmodul nicht konstant, sondern stark druckabhängig ist. Gleichung (6.4) lässt sich für diesen Fall

erweitern, indem Gl. (6.5) modifiziert wird:

$$q = \sum_j q_j \cdot \frac{\rho_{avg}}{\rho_0} \quad (6.6)$$

Hierbei ist ρ_0 die aktuelle Gasdichte in Domäne d_i und

$$\rho_{avg} = \frac{\rho_i + \rho_j}{2} \quad (6.7)$$

die mittlere Dichte der zwei Domänen entlang des Kontaktes j . Für ein ideales Gas ist die Dichte proportional zum Druck, d.h.:

$$\frac{\rho_{avg}}{\rho_0} = \frac{p_{avg}}{p_0} \quad (6.8)$$

mit mittlerem Druck p_{avg} und Referenzdruck p_0 bzw. -dichte ρ_0 . Damit folgt für die Druckberechnung der Gasausbreitung:

$$p(d_i) \rightarrow p(d_i) + K \cdot \frac{\Delta t}{V} \cdot \sum_j q_j \frac{p_{avg}}{p_0} - K \frac{\Delta V}{V} \quad (6.9)$$

Diese Beziehungen bilden die Grundlagen für die Analyse der hydromechanischen Simulation und werden in den nachfolgenden Abschnitten für die vergleichende Betrachtung von Gasen und Fluiden in vernetzten Porenräumen verwendet.

Basierend auf Gleichung (6.2) kann für die Simulation eine hydraulische Öffnungsweite zu einer gegebenen makroskopischen Permeabilität errechnet werden. Eine direkte Zuordnung von makroskopischen Permeabilitäten zu mikroskopisch gemessenen Rissöffnungsweiten ist allerdings von zahlreichen Annahmen durchzogen, die leicht anzuzweifeln sind. So bedeutet beispielsweise das lokale Auftreten von größeren Rissöffnungen nicht, dass die Gesamtprobe eine dementsprechend hohe makroskopische Permeabilität hat. Es ist also sehr viel sinnvoller, die hydraulische Öffnungsweite w eher als Skalierungsparameter zu sehen, der lediglich im Falle eines vollständig vernetzten Porenraumes eine Übereinstimmung mit der globalen Permeabilität der real durchströmten Probe ergibt. Dies gilt umso mehr, da auch die Anwendung der Darcy-Strömung aufgrund der Rauigkeit der realen Schichtflächen und anderen Randeffekten nur eine Näherungslösung darstellt und demnach über den Parameter w an die realen Probeneigenschaften angepasst werden kann, denn in einer realen Korngrenze wird die Öffnungsweite stark variieren und die Permeabi-

lität der gesamten Korngrenze von den Engstellen bestimmt sein (Abb. 6.2). Die genaue Berechnung von w anhand von experimentellen Permeabilitätsmessungen in Abhängigkeit des Einspannungszustandes wird in Kapitel 8 erläutert.

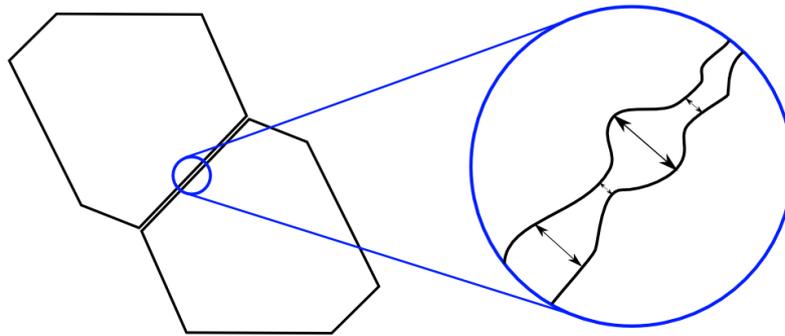


Abb. 6.2: Schematische Gegenüberstellung der stark variierenden realen Kluftöffnungen und der idealisierten glatten Korngrenzen.

Die dreidimensionale Berechnung von Kluftströmungen funktioniert in 3DEC prinzipiell analog zu UDEC, mit der Ausnahme, dass die Topologie in der dreidimensionalen Darstellung weitaus komplexer ist. Um dies zu beschreiben wird die Porenstruktur durch Fließflächen dargestellt, die miteinander an ihren Kanten durch „flow pipes“ und Eckpunkten durch „flow knots“ verbunden sind. Abb. 6.3 zeigt diese Elemente am Beispiel der Korngrenzenstruktur der würfelförmigen Voronoi-Körper aus Kapitel 5.1. Abgesehen von dieser deutlich komplizierteren Struktur werden die gleichen zugrundeliegenden hydromechanischen Relationen wie im zweidimensionalen Code UDEC verwendet. In den nachfolgenden Abschnitten wird das hydromechanische Verhalten von Gasen und Fluiden unter Verwendung der vorgestellten Beziehungen und Methoden analysiert.

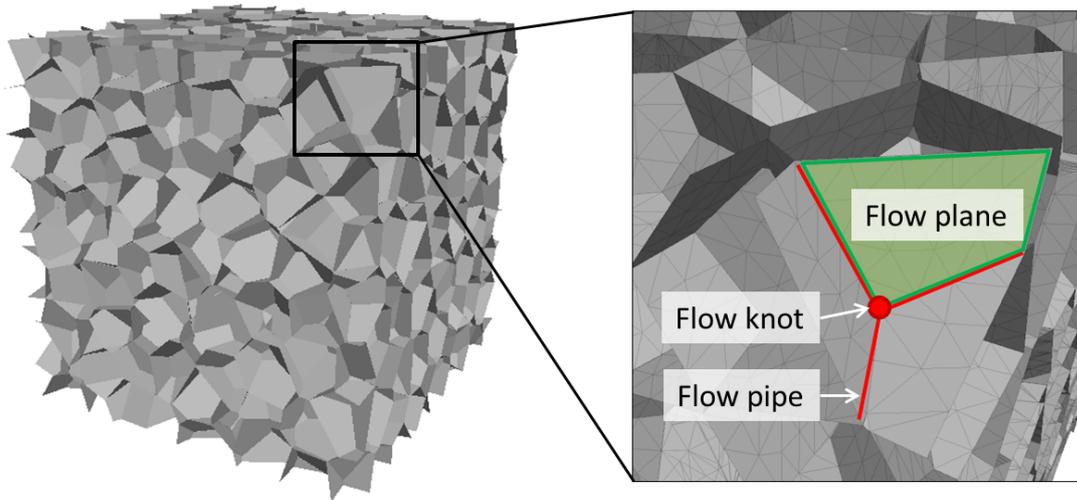


Abb. 6.3: Schichtflächentopologie für die 3D-Modellierung der Kluftströmung.

6.2 Gas- und Fluidausbreitung im Einzelschichtmodell

Rein hydraulische Berechnung einer einzelnen Fluidwegsamkeit

Am Anfang der Untersuchungen steht die Betrachtung einer einzelnen, bereits für die Fluidausbreitung geöffneten Schichtfläche, um die Funktionalität der hydraulischen Berechnungen in den diskontinuumsmechanischen Rechencodes sicherzustellen und gleichzeitig das Ausbreitungsverhalten von Fluiden und Gasen vergleichend zu untersuchen. Wie bereits in Kapitel 6.1 erläutert, ist das Strömungsverhalten maßgeblich von den folgenden Faktoren abhängig:

- hydraulische Öffnungsweite w_{Hydr}
- Kompressionsmodul K_{Fluid} des fließenden Mediums
- Viskosität μ_{Fluid} des fließenden Mediums

Das einfache Untersuchungsmodell enthält eine 10 m lange horizontale Schichtfläche und ist mit seinen Abmessungen in Abb. 6.4 dargestellt. Die Schichtfläche ist permeabel und für den Fluidfluss mit einer konstanten hydraulischen Öffnungsweite von $w = 2 \cdot 10^{-8}$ m zugänglich. Die Viskosität der Flüssigkeit beträgt 10^{-3} Pa·s und ihr Kompressionsmodul K_{Fluid} wird mit 2 GPa angesetzt. Für die vergleichende Gasberechnung wird die Gasviskosität mit 10^{-5} Pa·s und damit ca. zwei Größenordnungen geringer als die der Flüssigkeit angenommen. Zu Beginn der Simulation wird am linken Ende des Modells ein Fluidruck

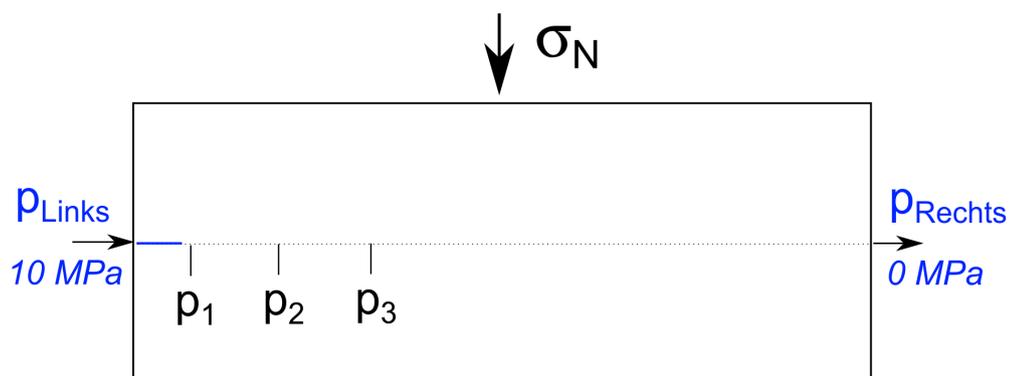


Abb. 6.4: Einzelschichtmodell mit einseitiger Fluid- bzw. Gasinjektion.

von 10 MPa angelegt und die zeitliche Entwicklung des Druckprofils entlang der Schichtung beobachtet. Der rechte Modellrand wird dabei auf $p = 0$ MPa fixiert, d.h. es sollte sich

im Zeitverlauf ein stationärer Zustand mit einem charakteristischen Druckprofil einstellen. Da es sich hier zunächst um eine rein hydraulische Berechnung handelt, werden keine Effekte aus der mechanischen Reaktion der Schichtfläche berücksichtigt.

Aus den Gleichungen (6.4) und (6.9) lässt sich bereits näherungsweise ableiten, wie sich die jeweiligen Ausbreitungsgeschwindigkeiten von Fluid und Gas verhalten werden. Betrachten wir die Strömung von einer gedachten Fluiddomäne d_1 in die anliegenden Domäne d_2 , so gilt bei gleicher Druckdifferenz für die Druckanstiege Δp_{Fluid} bzw. Δp_{Gas} und innerhalb eines Zeitschrittes δt :

$$\Delta p_{Fluid} = K_{Fluid} \frac{w^3}{12\mu_{Fluid}} \cdot \frac{p_2 - p_1}{L} \quad (6.10)$$

$$\Delta p_{Gas} = K_{Gas} \frac{w^3}{12\mu_{Gas}} \cdot \frac{p_2 - p_1}{L} \cdot \frac{p_{avg}}{p_0} \quad (6.11)$$

Da für ein ideales Gas aber $K_{Gas} = p_0$ ergibt der Vergleich beider Relationen:

$$\Delta p_{Gas} = \frac{\mu_{Fluid}}{\mu_{Gas}} \cdot \frac{p_{avg}}{K_{Fluid}} \cdot \Delta p_{Fluid} = F \cdot \Delta p_{Fluid} \quad (6.12)$$

Die Relation setzt sich effektiv aus dem Verhältnis der Viskositäten und dem Verhältnis der Kompressionsmoduli zusammen. Im Allgemeinen ist die Viskosität der Flüssigkeit deutlich höher als die des Gases, z.B. in unserem angesetzten Fall $\frac{\mu_{Fluid}}{\mu_{Gas}} = 100$. Für geringe Drücke ist allerdings $\frac{p_{avg}}{K_{Fluid}} \ll 1$, d.h. also im geringen Druckbereich ist bei gegebener Druckdifferenz $\Delta p_{Gas} \ll \Delta p_{Fluid}$ und somit die Fluidausbreitung in diesem Sinne „schneller“. Erst im höheren Druckbereich wird $F \geq 1$ und die Ausbreitungsgeschwindigkeit vergleichbar.

Unter Verwendung der obigen Randbedingungen und Parameter ergibt sich somit, dass sich die Flüssigkeit im Modell deutlich schneller ausbreiten sollte als das Gas. Die Auswertung der zeitlichen Druckentwicklung an den markierten Punkten im Modell bestätigt diese Annahme (Abb. 6.5a).

Nehmen wir nun in einer zweiten Variante einen Startdruck von 10 MPa in der Kluffläche an und belegen den linken Modellrand mit 20 MPa während der rechte Modellrand bei 10 MPa fixiert bleibt. Somit haben wir im Hinblick auf den angelegten Druckgradienten eine analoge Situation zur vorherigen Variante, aber aufgrund des erhöhten Ausgangsdruckes sagt Gl. (6.12) nun ein vergleichbares Verhalten von Δp_{Gas} und Δp_{Fluid} vorher. Wir erwarten

nun also eine deutliche Annäherung der Druckkurven von Gas- und Flüssigkeitsausbreitung, was erneut durch das Simulationsergebnis bestätigt wird (Abb. 6.5b).

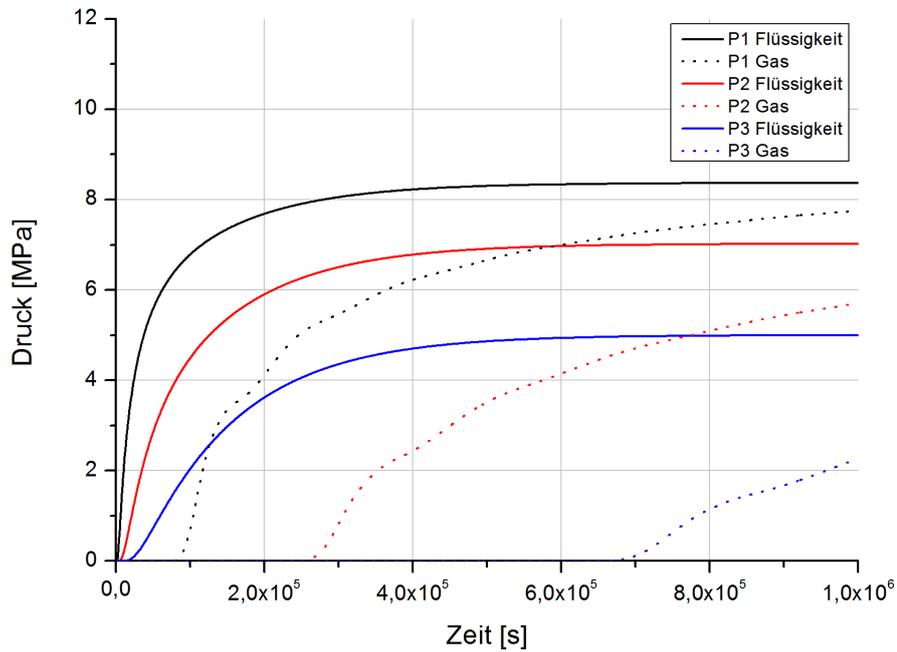
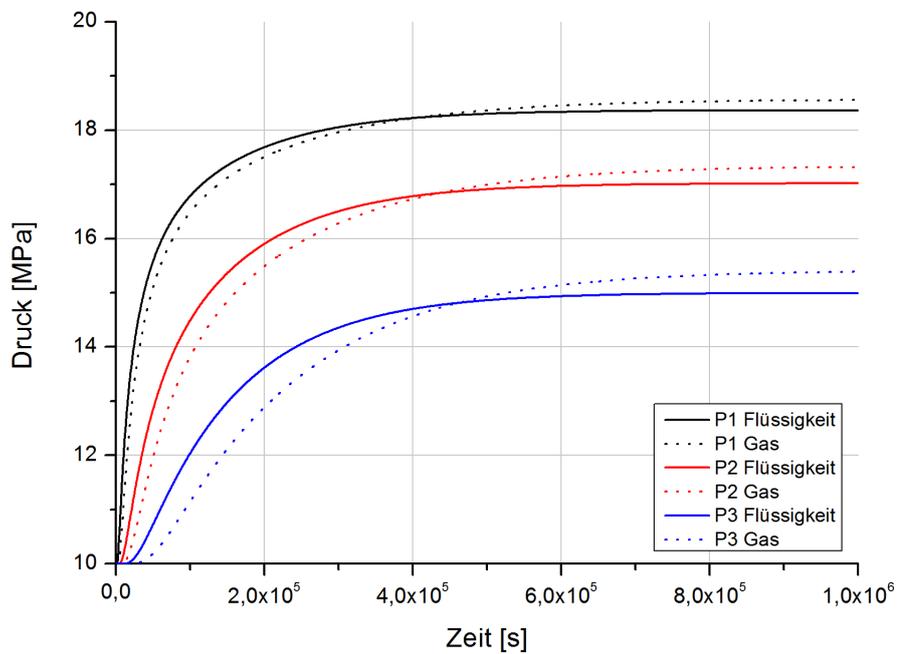
(a) $p_0 = 0$ MPa(b) $p_0 = 10$ MPa

Abb. 6.5: Druckentwicklung für die Flüssigkeits- und Gasausbreitung im einfachen Einzelschichtmodell bei verschiedenen Initialdrücken.

6.3 Druckgetriebene Öffnung von Fließwegen

Im Rahmen der diskontinuumsmechanischen Codes UDEC und 3DEC ist es also möglich, eine Kluftströmung entlang der Grenzflächen von diskreten Blöcken zu modellieren. Im Gegensatz zu geklüfteten Materialien sind die Korngrenzen als potentielle Fließwege im Steinsalz im ungestörten Zustand impermeabel und müssen erst durch hydro-mechanische Beanspruchungen in einen Versagenszustand überführt werden, bevor ein Einfließen von Fluiden möglich wird. Demnach muss auch das diskontinuumsmechanische Berechnungsprogramm in der Lage sein, die fluiddruck- oder schädigungsinduzierte Öffnung von initial verschlossenen Fließwegen abzubilden. Diese Funktionalität ist in beiden Programmsystemen vorhanden und ihre korrekte Wirkungsweise soll nachfolgend verifiziert werden.

Hierfür wird zunächst wieder eine horizontale Einzelschicht zwischen zwei Blöcken modelliert, die nun aber initial impermeabel ist, d.h. also keine Fluidausbreitung entlang der Schichtung zulässt (Abb. 6.6). Das Modell wird nun an der Unterkante festgehalten und mit einer definierten Auflast σ_N von oben belastet. In diesen Grundspannungszustand wird dann im Zentrum der Einzelschicht ein ansteigender Fluiddruck injiziert. Die mechanischen Parameter der Blöcke sowie der Kontaktschicht entsprechen denen aus Abschnitt 5.4, mit einer Ausnahme: Die hydraulische Zugfestigkeit σ_T wird mit 0 MPa angesetzt, d.h. die Fluidausbreitung sollte erst dann einsetzen, wenn der ansteigende Fluiddruck die aufgebrauchte Normalspannung erreicht bzw. übersteigt.

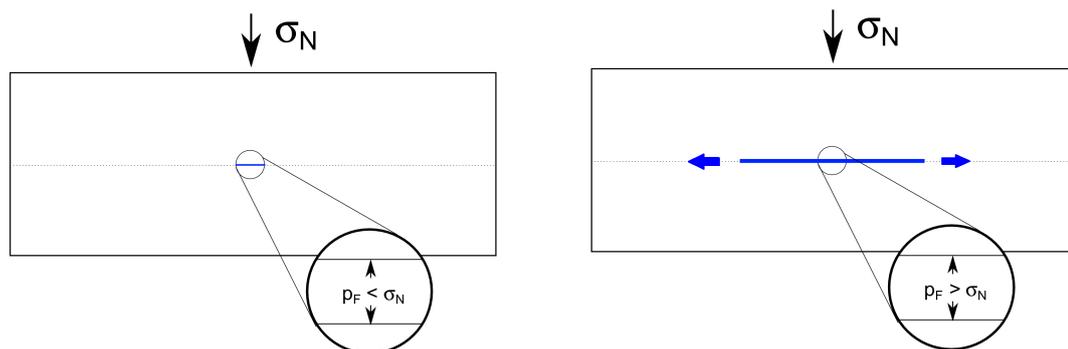


Abb. 6.6: Schematische Darstellung des Berechnungsmodells zum hydraulischen Aufreißversuch. Öffnung der Schichtfläche und Einströmen von Flüssigkeit, sobald $p_F > \sigma_N$.

Abbildung 6.7 zeigt das Ergebnis einer solchen Simulation in 3DEC bei einer Auflast von $\sigma_N = 10$ MPa anhand des Druckverlaufes im Zentrum und an einem weiteren Punkt entlang der Kluftfläche. Während der Druck im Zentrum als Randbedingung schrittweise

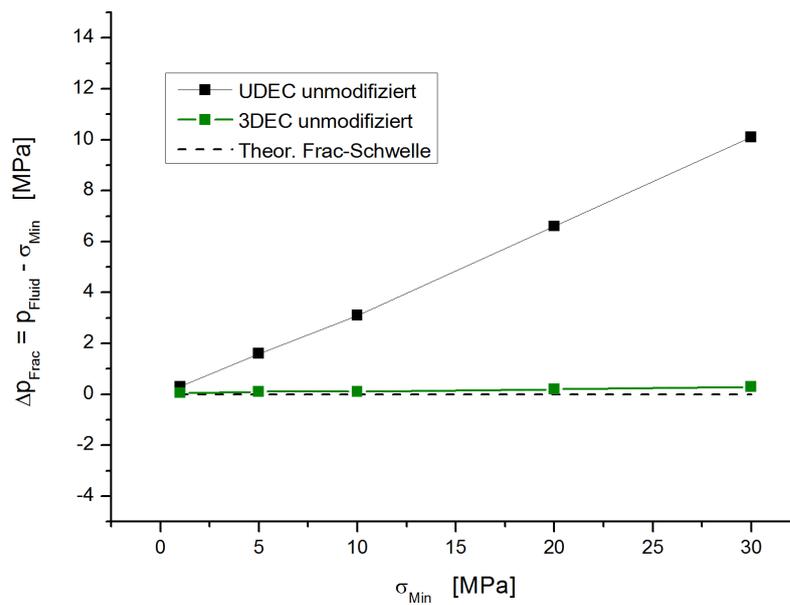


Abb. 6.8: Benötigter hydraulischer Aufreiß-Überdruck in Abhängigkeit der aufgetragenen Normalspannung.

der Kontakte an der Kluffläche abhängt. Abb. 6.10 zeigt den benötigten Überdruck in Abhängigkeit von Vernetzungsfeinheit und Normalsteifigkeiten. Im Allgemeinen lässt sich sagen, dass der benötigte Überdruck umso größer wird, je geringer die Normalsteifigkeit und je größer die Vernetzung ist.

Zwar wäre es denkbar, aus diesen Versuchen eine Abhängigkeitsmatrix für alle möglichen Parameterkombinationen abzuschätzen, um den Effekt lokal zu kompensieren, jedoch erscheint dies aufgrund der vielen Abhängigkeiten wenig praktikabel und ermöglicht darüber hinaus keinerlei Einblicke in die Ursachen dieses Effekts. Dies gilt umso mehr, wenn wir uns erneut in Erinnerung rufen, dass die 3D-Formulierung des Codes diese Probleme nicht zeigt. Demnach macht es zunächst Sinn, sich mögliche Unterschiede in der numerischen Formulierung beider Programme anzuschauen.

Die Ursache für dieses Verhalten findet sich dann – möglicherweise wenig überraschend – in der unterschiedlichen Topologie von Kontakten und Fluid-Domänen in UDEC und 3DEC. In UDEC wechseln sich entlang einer Schichtung Kontakte und Fluid-Domänen ab, während in 3DEC (sehr vereinfacht betrachtet) die Kontaktpunkte und die Fluidknoten prinzipiell an der gleichen Stelle sitzen (Vgl. Abb. 6.1). Für 3DEC hat dies den Effekt, dass der Fluiddruck direkt am mechanischen Kontakt wirkt und die Normalspannung genau um den Betrag des Fluiddruckes herabgesetzt wird. Aus diesem Grund „funktioniert“ der hydraulische Aufreißversuch bei 3DEC wie erwartet.

In UDEC hingegen wirkt der Fluiddruck nur indirekt, da er quasi „neben“ dem Kontakt bzw. nur an seinem nächsten Nachbarn sitzt. In den Rechnungen lässt sich daher beobachten, dass das Ansetzen eines Fluiddruckes p_{Fluid} beim anliegenden Kontakt nur eine Verringerung der Normalspannung um einen geringeren Anteil bewirkt, d.h.

$$\sigma_{eff} = \sigma_N - \alpha \cdot p_{Fluid} \quad (6.13)$$

mit $\alpha < 1$.

Durch ein lokales Kriterium mittels einer FISH-Funktion, dass die abgeschwächte Wirkung des Fluiddruckes in UDEC berücksichtigt, lässt sich der nötige Überdruck und der Effekt seiner Spannungsabhängigkeit völlig eliminieren (Abb. 6.9).

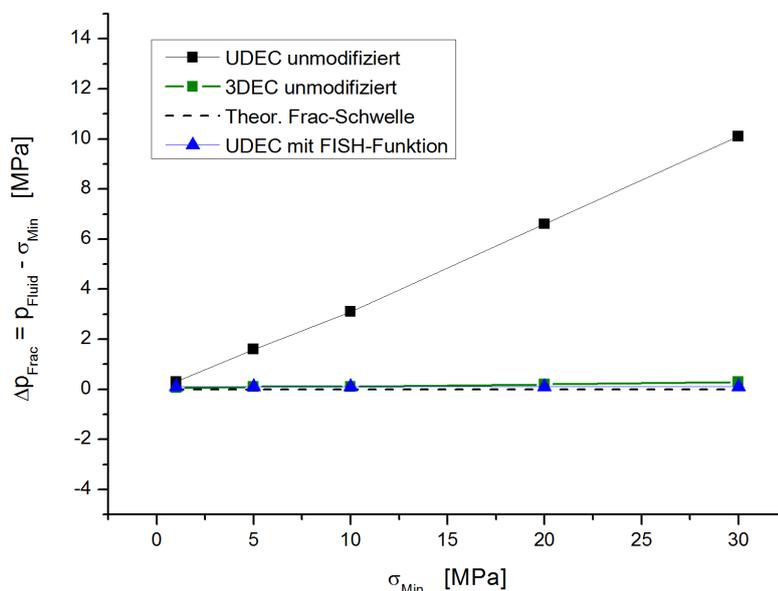


Abb. 6.9: Benötigter hydraulischer Aufreiß-Überdruck in Abhängigkeit der aufgebrachtten Normalspannung. Modifikation durch FISH-Routine.

Doch nicht nur der Normalspannungseffekt wird durch diese Korrekturfunktion entfernt. Wie Abb. 6.10 zeigt, wird hierdurch zusätzlich die Netzabhängigkeit vollkommen beseitigt. Auch die Abhängigkeit von der Normalsteifigkeit der Kontakte verschwindet fast völlig. Lediglich im Bereich sehr hoher Normalspannungen ($\sigma_N \geq 40$ MPa) in Kombination mit Normalsteifigkeiten deutlich unterhalb der Matrixkompressibilität ($k_N < 10^4$ MPa/m) wird dann noch eine etwas verfrühte Rissöffnung beobachtet. Aufgrund der in den Berechnungen verwendeten Bereiche der Normalsteifigkeiten ist dies für die dargestellten

Simulationen und Studien jedoch von geringerer Relevanz und würde darüber hinaus stets eine konservativere Einschätzung bewirken.

Es lässt sich festhalten, dass die topologischen Unterschiede in der Fluid-Kontakt-Struktur von UDEC und 3DEC im zweidimensionalen Falle eine Korrekturfunktion notwendig machen, mit deren Hilfe den problematischen Abhängigkeiten entgegengewirkt werden kann. Dennoch wäre die Ideallösung natürlich eine topologische Umstrukturierung in UDEC, die sich jedoch wohl nur mit großen Anstrengungen bewerkstelligen ließe.

Nachdem wir also die Funktionalität und die grundlegenden Abhängigkeiten der Fluidausbreitungssimulationen in UDEC und 3DEC untersucht haben, soll nun zur Ausbreitung in komplexeren Voronoi-Strukturen übergegangen werden. Da sich die Propagation entlang der Korngrenzen der Voronoi-Blöcke im Prinzip jeweils wieder auf einzelne Einzelschichtprobleme reduzieren lässt, müssen die einfachen Studien aus dem vorangehenden Abschnitt nicht wiederholt werden.

Stattdessen interessieren wir uns für die Effekte und Simulationsszenarien, in denen sich die zusätzliche geometrische Komplexität äußern wird. Da wir für die mechanische Wirkung bereits eine weitgehende Unabhängigkeit der Ergebnisse von der konkreten Voronoi-Diskretisierung und ihrer jeweiligen Feinheit gezeigt haben, sollen ähnliche Untersuchungen auch für die Fluidausbreitung vorgenommen werden.

Zunächst wird in ungekoppelter, reiner Fluidsimulation untersucht, ob die Feinheit des Voronoi-Rissflächennetzwerkes einen signifikanten Einfluss auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit hat. Der Hintergrund dieser Frage ergibt sich daraus, dass das Fluid bei gröberer Struktur möglicherweise deutliche „Umwege“ nehmen muss und somit die Ausbreitung verlangsamt wird. Um diesen Einfluss der Voronoi-Blockgröße auf die Fluidausbreitung zu untersuchen, betrachten wir in Analogie zum Abschnitt 6.2 das einseitige Einströmen von Flüssigkeit und die zeitliche Entwicklung der Fluidverteilung. Es wird nach vorgegebener Simulationsdauer überprüft, ob die eindringende Fluidfront trotz verschiedener Zerlegungen zu einem vorgegebenen Zeitpunkt an der gleichen Stelle angelangt ist. Dies würde es analog zu den Festigkeitseigenschaften auch für die Fluidberechnungen erlauben, die Salzstruktur mit größeren Voronoi-Salzkristalle zu simulieren als dies in der Realität der Fall ist.

Das 2D-Modell ist ein 10x10 m großes Quadrat, das mit unterschiedlichen mittleren Voronoi-Größen von 0,25 bis 2 m zerlegt wird. Am linken Modellrand wird dann erneut ein Randdruck von 10 MPa fixiert. Wie bereits beschrieben, handelt es sich um eine reine

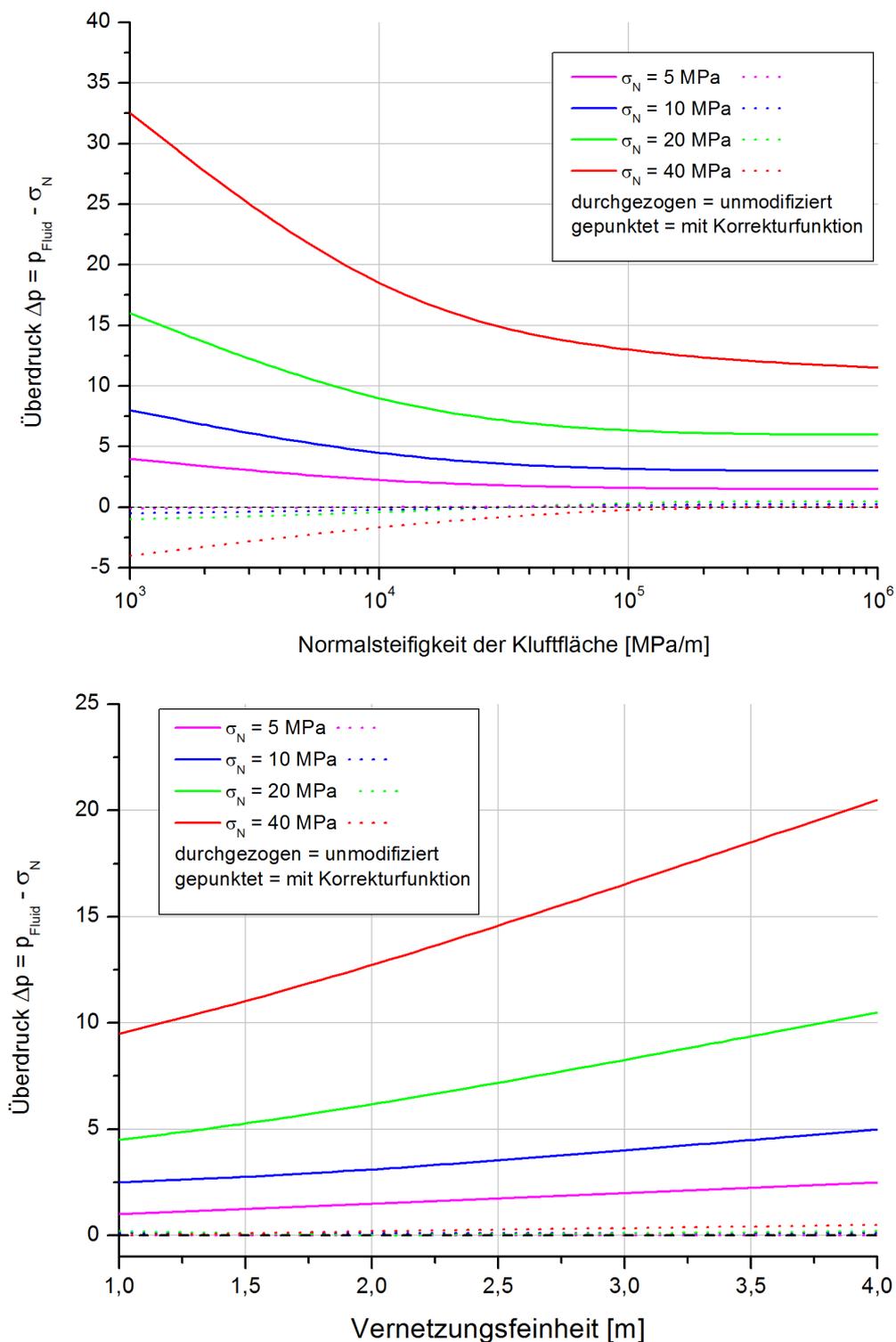


Abb. 6.10: Benötigter hydraulischer Aufreiß-Überdruck in Abhängigkeit der Normalsteifigkeit (oben) und der Vernetzungseinheit (unten) mit und ohne Zuhilfenahme einer Korrekturfunktion.

hydraulische Berechnung und die Korngrenzen werden als geöffnet und damit permeabel betrachtet. Die relevanten Parameter der Fluidausbreitung entsprechen denen aus Kapitel 6.2, wobei die Zeitskala der Ausbreitung hier irrelevant ist, da wir lediglich für die verschiedenen Modell bei gleichbleibenden Randbedingungen und Parametern untersuchen wollen, wie sich die Fluidfront entwickelt.

In Abbildung 6.11 wird die Fluidverteilung zum Zeitpunkt $t = 60\text{min}$ nach Beginn der Fluidinfiltration für die verschiedenen Modelle gegenübergestellt. Es ist unmittelbar ersichtlich, dass die Fluidfront in allen Modellen - unabhängig von der individuellen Zerlegung - in etwa die gleiche Distanz zurückgelegt hat. Bei genauerer Betrachtung ist entsprechend der eingehenden Vermutungen lediglich lokal eine geringfügig geringere Ausbreitungsgeschwindigkeit in der größten Struktur zu beobachten, die jedoch kein signifikantes Ausmaß annimmt.

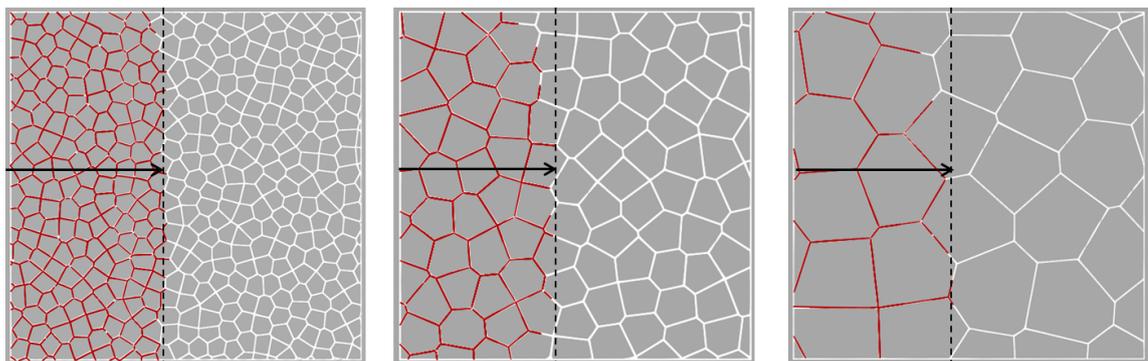


Abb. 6.11: Fluidausbreitung ca. 60 min nach Beginn der einseitigen, freien Infiltration in verschieden fein zerlegte Voronoi-Strukturen.

Damit kann also festgestellt werden, dass zumindest aus rein geometrischen Gesichtspunkten durch den Coarse-Graining Prozess keine unzulässige Verfälschung der Fluidausbreitungsdynamik bewirkt wird und somit auch für die hydro-mechanisch gekoppelten Berechnungen auf Voronoi-Zerlegungen zurückgegriffen werden kann, die eine geringe Feinheit als die reale Salzstruktur aufweisen.

Aufgrund der expliziten Natur der Fluidberechnung in diskontinuumsmechanischen Rechencodes wird sich das Fluid nach Überschreitung der Perkolationschwelle stets entlang des geringsten Widerstandes, d.h. der geringsten Normalspannungen fortbewegen. Diese Abhängigkeit der Perkolationsrichtung vom gegenwärtigen Spannungszustand wird in aller Ausführlichkeit bei der Validierung und Nachrechnung von Extensionsversuchen und Drucktests an Bohrlöchern in Kapitel 7.5 untersucht und somit hier nicht mit einem

zusätzlichen Testmodell diskutiert. Die bisherigen Untersuchungsmodelle haben jedoch gezeigt, dass die Funktionalität der hydraulischen Berechnungskomponenten bestätigt wurde und die grundlegenden Mechanismen der perkolutiven Fluidpropagation durch den diskontinuumsmechanischen Ansatz abgebildet werden können.

Kapitel 7

Validierung

7.1 Einachsiale Druckversuche an zylindrischen Prüfkörpern

7.1.1 Coarse-Graining-Vorstudie

Die Korngrößenverteilung typischer Salzgesteine liegt im Bereich von einigen Mikrometern bis hin zu Zentimetern. Für die gebirgsmechanische Modellierung von Steinsalzpfailern, Kavernen und anderen Aufgabenstellungen müsste also eine immense Anzahl von diskontinuumsmechanischen Elementen simuliert werden, wenn man die Feinstruktur bis auf die Größenordnung der Salzkristalle abbilden möchte. Wie der folgende Abschnitt jedoch demonstriert, lassen sich die aus der diskontinuierlichen Natur der Salzgesteine folgenden Eigenschaften bereits mit einer deutlich gröberen Kristallstruktur qualitativ und quantitativ erfolgreich modellieren. Dieser Ansatz der gezielten Vergrößerung – das sogenannte „Coarse Graining“ – wird es ermöglichen, auch geologisch relevante Größenordnungen durch die diskontinuumsmechanische Methode mit lediglich geringfügigen Anpassungen für die hydraulischen Eigenschaften zu simulieren.

Um dies zu illustrieren, wird zunächst ein zylindrischer Prüfkörper mit drei verschiedenen mittleren Korngrößen einem einachsialen Druckversuch unterzogen. Für diese einfache Studie wird die vollständige Modellierungsmethodik für das visko-elasto-plastische Stoffmodell (Kapitel 5) noch nicht verwendet. Stattdessen werden die Blöcke selbst rein elastisch modelliert, während ein lineares Mohr-Coulomb Schermodell auf den Korngrenzen wirkt. Für die Modellierung der komplexen Eigenschaften von Salzgesteinen sind diese

Stoffmodelle zwar ungeeignet, sind jedoch für die anvisierte Diskretisierungsstudie eine einfache und leicht reproduzierbare Möglichkeit, das spröde Versagen eines Prüfkörpers ohne plastische Verformung abzubilden. Die simulierte Probe wird daher zunächst rein elastisch reagieren, bis die Scherfestigkeiten auf den Korngrenzen überschritten werden, woraufhin der Prüfkörper schlagartig versagt. Im Rahmen dieser Studie interessiert dabei vor allem, ob der Bruchpunkt - also die Festigkeit der Probe - unabhängig von der Feinheit der Blockstruktur bleibt.

Tab. 7.1: Materialparameter der Coarse-Graining Vorstudie eines einaxialen Druckversuches.

Zoneneigenschaften			
<i>Elastisches Stoffmodell</i>			
Kompressionsmodul K [GPa]	16,7	Schermodul G [GPa]	10
Dichte [kg/m^3]	2450		
Schichtflächeneigenschaften			
<i>Mohr-Coulomb Modell</i>			
Normalsteifigkeit k_N [GPa/m]	10	Kohäsion [MPa]	6
Schersteifigkeit k_S [GPa/m]	2	Restkohäsion [MPa]	0
Reibungswinkel [$^\circ$]	30	Zugfestigkeit [MPa]	4
Restreibungswinkel [$^\circ$]	15	Restzugfestigkeit [MPa]	0

Zusätzlicher positiver Nebeneffekt dieser Berechnungen ist die vergleichende Validierung mit den Resultaten ähnlicher Simulationen in [68, 74], weshalb die dortige Parametrisierung für das Mohr-Coulomb Modell hier übernommen wird. Tabelle 7.1 stellt die Gesamtparametrisierung für diese Simulationsstudie zusammen. Im Hinblick auf die Modellierung großräumiger Strukturen wurde die Probe mit einer Größe von 12 m und einem Durchmesser von 6 m dargestellt. Im Vergleich zu [68] bedeutet dies lediglich etwas geringere Kontaktsteifigkeiten entsprechend der Relationen in Abschnitt 5.1. Das Verhältnis von Höhe zu Durchmesser entspricht den Empfehlungen zu Druckversuchen an zylindrischen Prüfkörpern [75].

Die zylindrischen Prüfkörper werden nun in den Simulationen zwischen zwei Stahlplatten platziert und die obere Druckplatte mit konstanter Geschwindigkeit nach unten bewegt (verformungsgeregelte Versuchsführung). In Anlehnung an reale einachsiale Druckversuche wird eine hohe Endflächenreibung zwischen Stahlplatten und den Stirnseiten der Zylinderproben angenommen. Innerhalb der Simulation wird die axiale Spannung



Abb. 7.1: Diskontinuumsmechanischer zylindrischer Probenkörper mit drei verschiedenen mittleren Korngrößen.

ermittelt und protokolliert indem die mittlere Normalspannung der Kontaktfläche zwischen Zylinder und oberem Druckstempel berechnet wird. Zur Kontrolle wird diese Auswertung auch für die Kontaktfläche zur Bodenplatte vorgenommen, um zu gewährleisten, dass die Verformungsgeschwindigkeit nicht zu hoch ist. Alternativ kann die Geschwindigkeit des Druckstempels auch an die Spannungsdifferenz zwischen den beiden Kontaktflächen zu den Stahlplatten gekoppelt werden, worauf in dieser Arbeit jedoch verzichtet wurde, da somit eine quasi-zufällige Komponente in den Versuchsablauf eingeht und streng genommen nicht mehr mit den konstant weggeregelten realen Druckversuchen verglichen werden kann. Aus diesem Grund wurde die Verformungsgeschwindigkeit aus Testrechnungen so gewählt, dass der Unterschied zwischen beiden Spannungswerten nie größer als 0,1 MPa wurde.

Abb. 7.2 zeigt die Ergebnisse des einachsialen Druckversuches an den drei verschiedenen grobkörnigen Zylinderproben im Vergleich zu den Resultaten der ähnlichen Modellierung in [74].

Alle Proben zeigen das erwartet spröde Bruchverhalten nach dem Erreichen der maximalen Festigkeit, die für die verwendeten Parameter bei ca. 15 MPa liegt und zwischen den unterschiedlichen Modellen kaum variiert. Es zeigt sich bei zunehmend größeren Kristallgrößen lediglich eine leichte Neigung zu einem insgesamt etwas spröderem Nachbruchverhalten, was sich dadurch begründen lässt, dass das Herausbrechen eines Blockes natürlich einen stärkeren Einfluss auf das Festigkeitsverhalten der Restprobe haben wird, je größer dieser Block in Relation zur Gesamtprobe ist. Die Abweichungen im Anstieg der elastischen Reaktion ergeben sich in Übereinstimmung mit den Überlegungen im

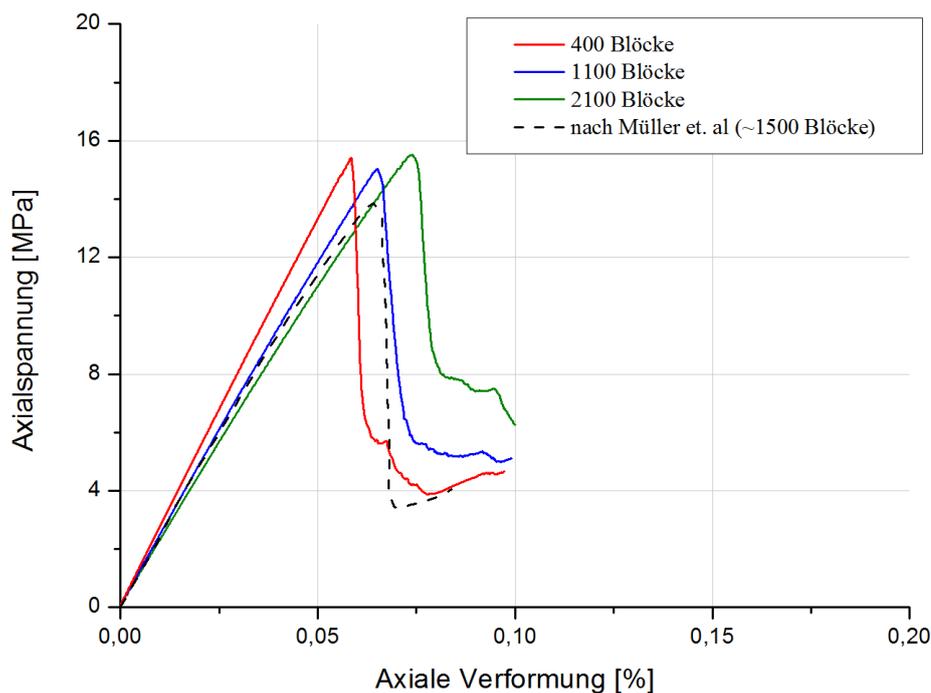


Abb. 7.2: Ergebnisse der diskontinuumsmechanischen Studie mit Druckversuchen an verschieden grob diskretisierten Zylinderproben.

vorangehenden Abschnitt: Bei Veränderung der Blockanzahl verschieben sich die Anteile der inter- und intra-kristallinen elastischen Verformungen für die Gesamtprobe, sodass bei geringen Blockzahlen die intrakristalline Deformation dominiert und vice versa.

Insgesamt bestätigen diese Ergebnisse jedoch die Eingangsthese, dass die Effekte der diskontinuierlichen Gesteinsstruktur bereits bei weitaus größeren Korngrößen im Vergleich zu den realen Salzkörnern auftreten und die diskontinuumsmechanische Modellierung somit auch für praktisch relevante Größenordnungen angewandt werden kann. Das Ergebnis der vergleichbaren Simulation aus [68] ordnet sich gut in die Resultate unserer Berechnungen ein und weicht lediglich in der maximalen Festigkeit um ca. 8% ab. Damit betrachten wir also auch den in dieser Arbeit verwendeten grundlegenden Berechnungsablauf der diskontinuumsmechanischen Modellierung im Vergleich mit ähnlichen Arbeiten als validiert.

7.1.2 Modellaufbau, Randbedingungen und Berechnungsvarianten

Die vorangehend erläuterte Modellierungsstrategie wurde nun zur Nachrechnung der einachsialen Kompressionsversuche an zylindrischen Probenkörpern mit Schlankheitsmaß 1

angewandt. Hierfür wurde der drei-dimensionale Prüfkörper mit 1010 Voronoi-Elementen modelliert, wodurch im Mittel etwa 10 Blöcke pro Probenhöhe vorhanden sind. Die Ver-



Abb. 7.3: Zylinderförmiger Probekörper in der diskontinuumsmechanischen Modellierung durch Voronoi-Zerlegung (links, verschiedene Blöcke farblich markiert) im Vergleich zur realen Probe (rechts).

gleichsberechnungen in Abschnitt 7.1.1 hatten gezeigt, dass auch bei deutlich geringeren Diskretisierungseinheiten (≈ 400 Elemente) nur geringe Abweichungen in den ermittelten Festigkeiten festzustellen sind, sodass die gewählte Blockdichte im Sinne einer möglichst genauen Erfassung der Bruch- und Versagensmechanismen deutlich oberhalb der minimalen Blockanzahl liegt, während das Modell dennoch rechentechnisch in vertretbaren Zeiträumen realisierbar bleibt.

Die nachzurechnenden Laborversuche waren sowohl verformungs- als auch kraft-geregelt durchgeführt wurden (Anhang A.1), weshalb auch in der Modellierung beide Verfahrensweisen simuliert worden sind. Diese unterscheiden sich vor allem in der Dynamik im Nachbruchbereich: Bei kraftgeregelten Versuchen erfolgt mit dem Erreichen der Bruchfestigkeit ein spontaner Verlust der Tragfähigkeit, d. h. die Proben kollabieren in Sekundenbruchteilen schlagartig, während sich im verformungsgeregelten Versuch ein allmählicher Übergang in ein Plateau entsprechend eines stabilen Restfestigkeitsniveaus ergibt. Ursächlich hierfür sind die lokal unterschiedlichen Verformungen. Der Vergleich der Bruchbilder während und nach dem Verformungsversuch zeigt, dass sich in beiden Fällen mit einsetzender plastischer Verformung zunächst nach einer Auflockerung der Mantelfläche Scherbahnen entlang eines auf den stumpfen Spitzen stehenden Doppelkegels ausbilden, wobei es auf der Außenseite mit fortschreitender Verformung zu erheblichen Abschaltungen kommt. Die stumpfen Kegelspitzen berühren sich im Probenzentrum und

besitzen trotz des offensichtlichen Querschnittsverlustes durch die Abschaltungen aufgrund der erzielten Verfestigung eine erhebliche Resttragfähigkeit. Während sich im weggeregelten Verformungsversuch nach dem Probenbruch infolge der durch die Maschinenregelung erfolgten Abnahme der Axialspannung die lokalisierte Verformung auf den Scherbahnen stabilisiert, kommt es im kraftgeregelten Versuch zu einer Überlastung des Pfeilerkerns, der zum schlagartigen Abgleiten der Scherkegel führt. Auch nach dem Beräumen der Versuchskörper nach Versuchsende bleiben die Reste der Doppelkegel erhalten, wobei sich im weggeregelten Versuch die Kegelspitzen nach wie vor berühren und auch mechanisch stabil sind (Abb. 7.4).



Abb. 7.4: Prüfkörper nach weggeregeltem Druckversuch im Laborversuch (links) und der Simulation (rechts). Abschaltungen jeweils nach Versuchsende entfernt.

Als weitere Berechnungsvariante wurde zusätzlich eine Simulation durchgeführt, in der keine Endflächenreibung zwischen Probekörper und Stempel angenommen wurde. Eine derartige Versuchsführung war zwar nicht Teil des Untersuchungsprogrammes am Steinsalz, aber charakterisierte sich in anderen Versuchen durch eine deutlich geringere Tragfähigkeit und vertikal orientierten Rissstrukturen bis in den Pfeilerkern hinein. Von daher war es von Interesse, ob die diskontinuumsmechanische Modellierung auch diese Effekte qualitativ bestätigen kann.

7.1.3 Berechnungsergebnisse

Abbildung 7.5 zeigt das Ergebnis der Simulation bei Verformungsregelung zusammen mit den experimentell erhaltenen Kurvenscharen, die den Bereich der Streuung verdeutlichen. Die errechnete Tragfähigkeitskurve ordnet sich hervorragend in die experimentellen

Messwerte ein, insbesondere bezüglich der maximalen Tragfähigkeit und der langsam abfallenden Axialspannung im Nachbruchbereich (zugehörige Modellparameter zusammengestellt in den Anlagen B.1 & B.2).

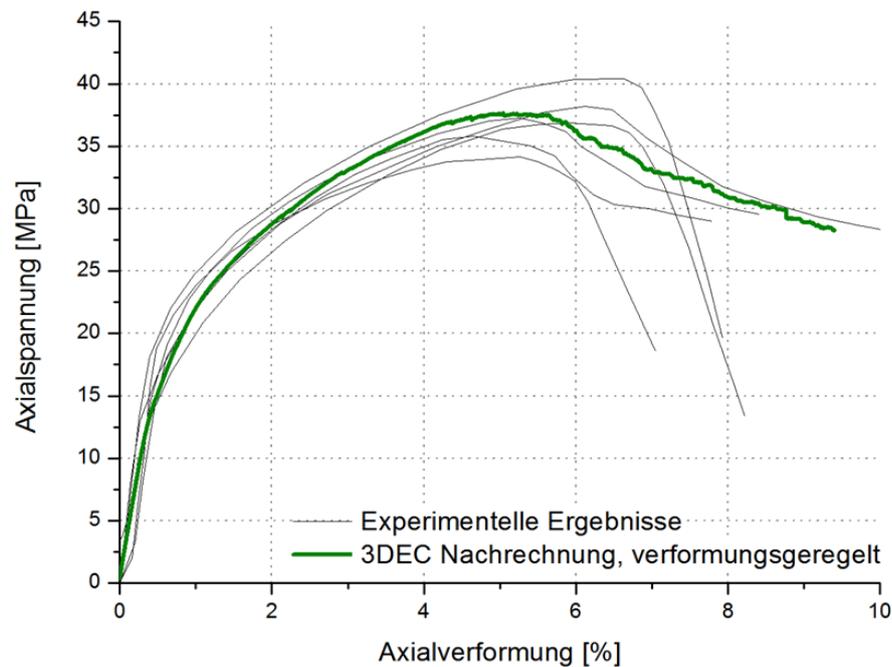


Abb. 7.5: Berechnete Tragfähigkeitskurve im Vergleich zu den Laborergebnissen.

Die detaillierte Untersuchung des Bruchverhaltens in dieser Simulation ermöglicht einen Einblick in die auftretenden interkristallinen Versagensmechanismen. Zu Beginn der Belastung treten bereits ab 0,1 % Verformung erste Zugrisse in der Probe auf und zeigen damit das Einsetzen von dilatanter Schädigung (Abb. 7.6, blaue Kurve). Anhand eines normierten Windplots der Rissorientierungen kann man ablesen, dass diese Zugrisse in Übereinstimmung mit den Ergebnissen von AE-Untersuchungen vornehmlich parallel zur Belastungsachse, d.h. vertikal ausgerichtet sind (Abb. 7.7). Erst ab ca. 3 % axialer Verformung nimmt auch die Anzahl auftretender Scherrisse spürbar zu (grüne Kurve in Abb. 7.6), deren mittlerer Winkel bezüglich der z -Achse, α_z , sich mit ansteigender Verformung ebenfalls erhöht. Im Verformungsbereich von 6 bis 9 % axialer Deformation bedeutet diese einen mittleren Winkel von $\alpha_z=25^\circ$ bei Maximalwerten von bis zu 40° .

Bei kraft geregelter Verfahrensweise (Anhang A.2, blaue Kurve) ergibt sich zunächst eine fast identische Tragfähigkeitskurve, die aufgrund der kontinuierlichen weiteren Belastung das Tragfähigkeitsmaximum der Verformungsregelung leicht überschreitet, woraufhin die Probe infolge des überlasteten Pfeilerkernes spröde versagt. Damit hat das

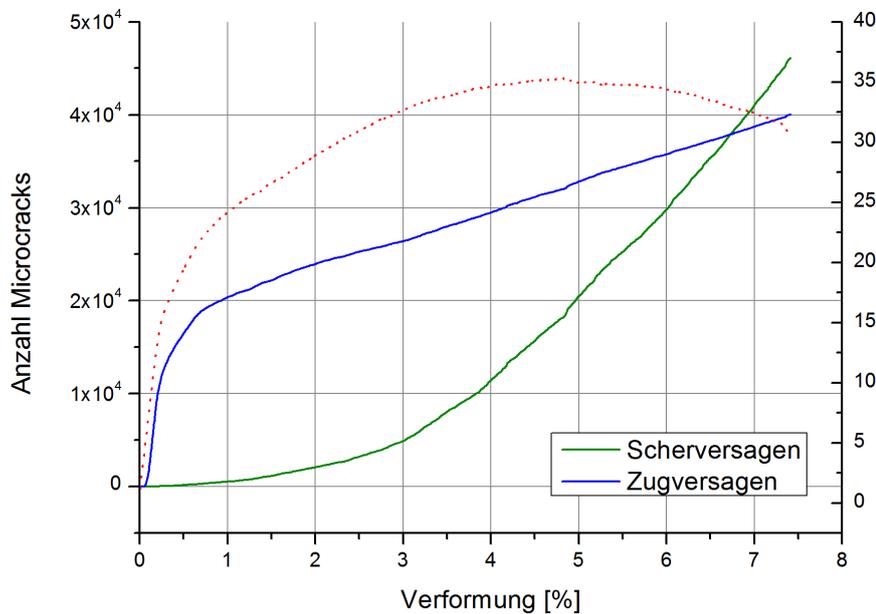


Abb. 7.6: Anzahl der Mikrorisse durch Zug- und Scherbeanspruchung in Abhängigkeit der axialen Deformation.

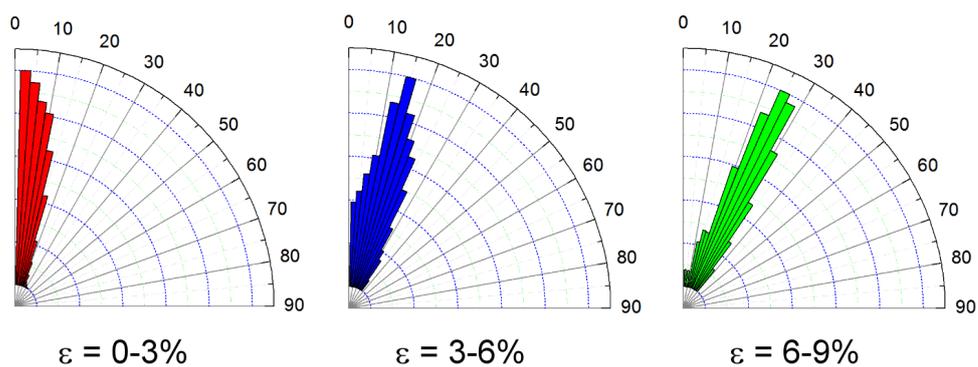


Abb. 7.7: Windplots zur Orientierung der gebildeten Risse in verschiedenen Verformungsbereichen.

diskontinuumsmechanische Modell das qualitative und quantitative Verhalten der Laborversuche erfolgreich reproduziert und den Einfluss der Verformungsrandbedingungen korrekt nachvollzogen.

Die zusätzliche Berechnungsvariante mit geringer Endflächenreibung ist in Anhang A.2 durch die rote Kurve dargestellt. Wie erwartet, bilden sich vertikale Rissstrukturen bis in den Pfeilerkern hinein (Anhang A.3) und führen zu einer deutlichen Verringerung der Proben­tragfähigkeit, womit durch die Berechnungen eine weitere experimentelle Beobachtung reproduziert werden konnte.

7.2 Triaxiale Druckversuche an zylindrischen Prüfkörpern

7.2.1 Modellaufbau, Zielstellung und Volumenmessung

Nachdem das Prüfkörperverhalten unter einachsialer Belastung bei verschiedenen Randbedingungen erfolgreich reproduziert werden konnte, ist als nächster Schritt das Verhalten unter triaxialer Einspannung zu untersuchen. Hierbei sind im besonderen die folgenden Fragestellungen für die diskontinuumsmechanische Simulation relevant:

- Wird bei zunehmender Einspannung eine ansteigende Festigkeit und höhere Gesamtverformung bis zum Bruchpunkt beobachtet?
- Kann der Übergang zum viskoplastischen Fließen ohne Entfestigung abgebildet werden?
- Inwieweit stimmt die volumetrische Auflockerung als Maß für die Prüfkörperschädigung mit dem Experiment überein?

Bei den nachzurechnenden Laborversuchen handelt es sich um triaxiale Druckversuche an Steinsalzprüfkörpern der gleichen Lokalität wie sie im Rahmen der einachsialen Druckversuche verwendet wurden, wobei das Verhältnis Höhe:Breite der zylindrischen Proben jedoch nun 2:1 beträgt. Für die Simulation der verschiedenen Einspannungen wurde die äußere Oberfläche der modellierten Prüfkörper mit der entsprechenden Normalspannung beaufschlagt und unter diesen Randbedingungen relaxiert. Der Simulationsablauf selbst ist dann identisch zu den verformungsgeregelten einaxialen Druckversuchen im vorherigen Abschnitt.

Die Auswertung der Dilatanz im Laufe der Berechnungen gestaltet sich dabei jedoch kompliziert, denn in diesem Fall kann nicht wie in einem kontinuumsmechanischen Modell einfach über die Volumina der Elemente summiert werden, da die entstehenden Hohlräume bei der explizit modellierten Rissbildung davon nicht erfasst werden. Stattdessen muss in Analogie zum tatsächlichen Laborexperiment aus der äußeren Einhüllenden des Prüfkörpers das Volumen errechnet werden. Aus der Betrachtung einer typischen Dilatanzkurve lässt sich eine benötigte Genauigkeit von mindestens 0.1 % bei der Bestimmung des Prüfkörpervolumens ableiten, um den Dilatanzeffekt auflösen zu können. Vorstudien haben

gezeigt, dass es aufgrund der rauen Oberflächenstruktur und dem bei hohen Verformungen nicht zwingend symmetrischen Verformungsbild im Hinblick auf die geforderte Genauigkeit nicht ausreicht, das Volumen anhand einer einfachen Fassregel mit einem maximalen Durchmesser D und Ausgangsdurchmesser d zu ermitteln:

$$V = \frac{\pi}{12} h (2D^2 + d^2) \quad (7.1)$$

Stattdessen wurde die radiale Verschiebung entlang von 7 horizontalen Umrissen anhand von jeweils 8 Stützstellen gemessen und die mittleren Radien r_1 bis r_7 berechnet (Abb. 7.8).

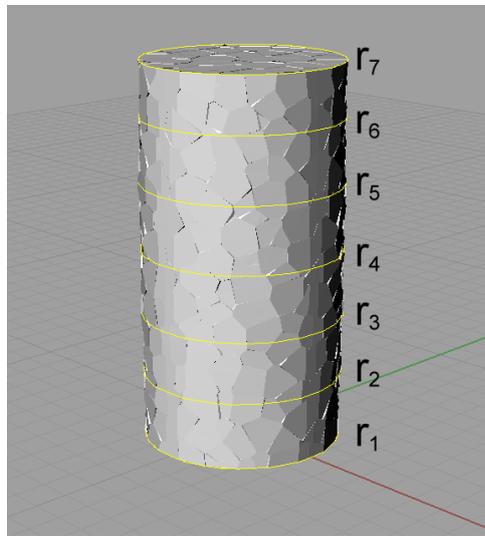


Abb. 7.8: Volumenmessung am diskontinuumsmechanischen Modell anhand von 7 Kontrollradien.

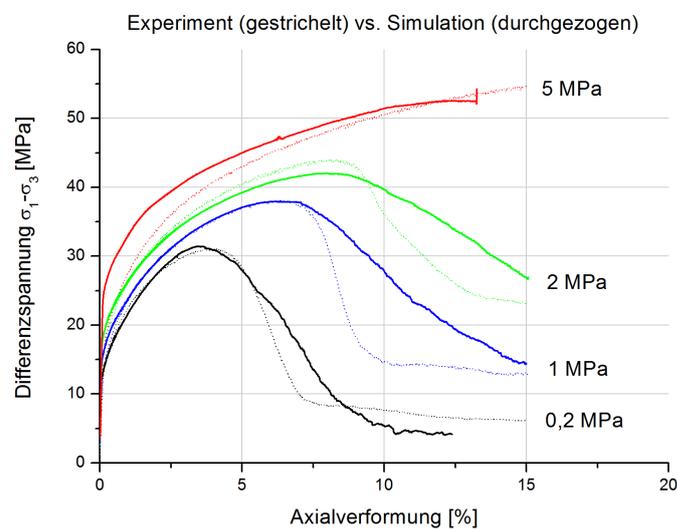
Auf deren Grundlage kann dann das Volumen unter Anwendung der Simpson'schen Regel approximiert werden mit:

$$V = \frac{\pi}{36} h (r_1^2 + r_7^2 + 2 \cdot (r_3^2 + r_5^2) + 4 \cdot (r_2^2 + r_4^2 + r_6^2)) \quad (7.2)$$

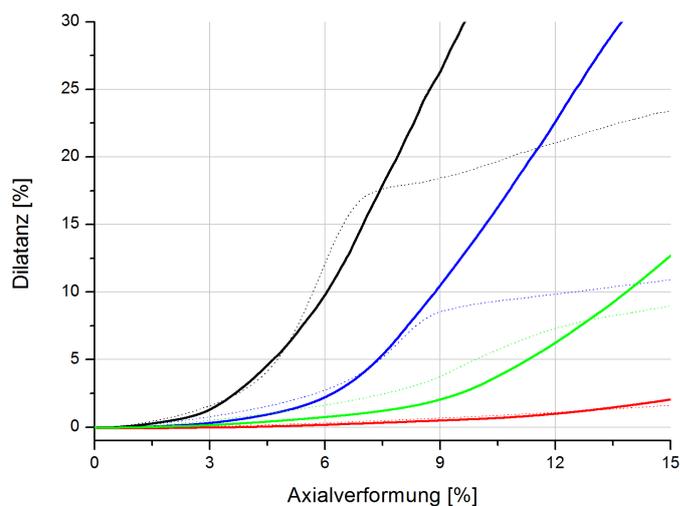
7.2.2 Ergebnisse

Die berechneten Tragfähigkeitskurven für verschiedene Einspannungen sind in Abb. 7.9a dargestellt (Parameter gemäß Anlage B.1 & B.2). Es ist zunächst festzuhalten, dass bezüglich der erreichten maximalen Festigkeiten und Verformungen eine gute Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Kurven besteht und die Genauigkeit stets innerhalb

der typischen Abweichungen zwischen verschiedenen Prüfkörpern liegt. Insbesondere ist die zunehmende effektive Festigkeit mit steigender Einspannung zu beobachten, die bei ausreichend hoher Einspannung den Übergang zum viskoplastischen Fließen vollzieht.



(a)



(b)

Abb. 7.9: Nachrechnung triaxialer Druckversuche an Steinsalzproben im Vergleich zu Labordaten.

Hinsichtlich des einspannungsabhängigen Verformungsverhaltens hat die diskontinuumsmechanische Berechnung auch in diesem Beispiel die essentiellen Charakteristiken des Verformungs- und Bruchprozesses erfolgreich abgebildet. Auch die Dilatanzentwicklung in Abb. 7.9b bestätigt zunächst das qualitativ erwartete Verhalten unter triaxialer Kompression: Auf einen Bereich der Volumenabnahme folgt mit dem Einsetzen der mikroskopischen Schädigung und Rissbildung eine Zunahme des Probenvolumens, die umso ausgeprägter

ist, je geringer die Einspannung des Prüfkörpers ist. Wie der Vergleich mit den experimentellen Labordaten zeigt, wurde jedoch nicht nur die qualitative Schädigungsdynamik in den diskontinuumsmechanischen Berechnungen reproduziert, sondern im Rahmen der Genauigkeit der Volumenapproximation über Gl. (7.1) auch eine sehr gute Übereinstimmung mit den quantitativen Messwerten erzielt.

Lediglich im Nachbruchbereich bei großen Verformungen fallen die diskontinuumsmechanischen Prüfkörper unter das experimentell ermittelte Restfestigkeitsniveau, während die Dilatanzkurve nicht abknickt, sondern weiter ansteigt. Die Ursache hierfür wird in der zunehmenden Bedeutung von Kristallentfestigungsprozessen im späten Nachbruchbereich bei realen Prüfkörpern gesehen, die ein Durch- bzw. Abscheren der kristallographischen Ebenen der Kristalle selbst ermöglichen, wodurch die Prüfkörperverformung dann fast volumenkonstant entlang von makroskopischen Scherbahnen erfolgt und nicht länger durch neue intrakristalline Rissbildung. Ohne diesen Mechanismus muss die Last weiterhin durch Rissbildung und -aufweitung abgebaut werden, weshalb in den Simulationen die Dilatanzkurve weiter steigt und die Restfestigkeit leicht abnimmt.

Im nachfolgenden Abschnitt 7.2.3 werden die Hintergründe und die Plausibilität dieser Begründung ausführlich behandelt und gleichzeitig demonstriert, wie diesen Effekten Rechnung getragen werden kann, um diese letzte Diskrepanz im hochverformten post-failure-Bereich zu eliminieren. An dieser Stelle der Beurteilung der modellierten triaxialen Druckversuche sei lediglich zusammengefasst, dass die diskontinuumsmechanische Simulation alle anwendungsrelevanten Charakteristika von plastischer Verfestigung, maximalen Tragfähigkeiten, Dilatanzentwicklung bis hin zum Übergang ins dilatanzfreie plastische Fließen hervorragend abbildet und lediglich im anwendungstechnisch weniger relevanten späten Nachbruchbereich Unterschiede vorzufinden sind.

Die Schädigungsentwicklung im Inneren des Prüfkörpers – insbesondere bei geringen Einspannungen – lässt sich besonders gut in einem Schnittbild durch den Prüfkörper veranschaulichen (Abb. 7.10). Durch die erhöhte Einspannung im Bereich der Druckstempel bilden sich am oberen und unteren Ende der Probe Druckkegel, entlang derer die Korngrenzen abscheren und somit die Abschalungen in horizontaler Richtung herausgedrückt werden. In Anlage A.4 sind zusätzliche Abbildungen der modellierten Prüfkörperverformungen im Vergleich zu ähnlichen realen Proben zusammengestellt.

Zusätzlich zur Quantifizierung der Prüfkörperschädigung über die Messung der volumetrischen Auflockerung kann die Schädigungsentwicklung auch durch die Veränderung der

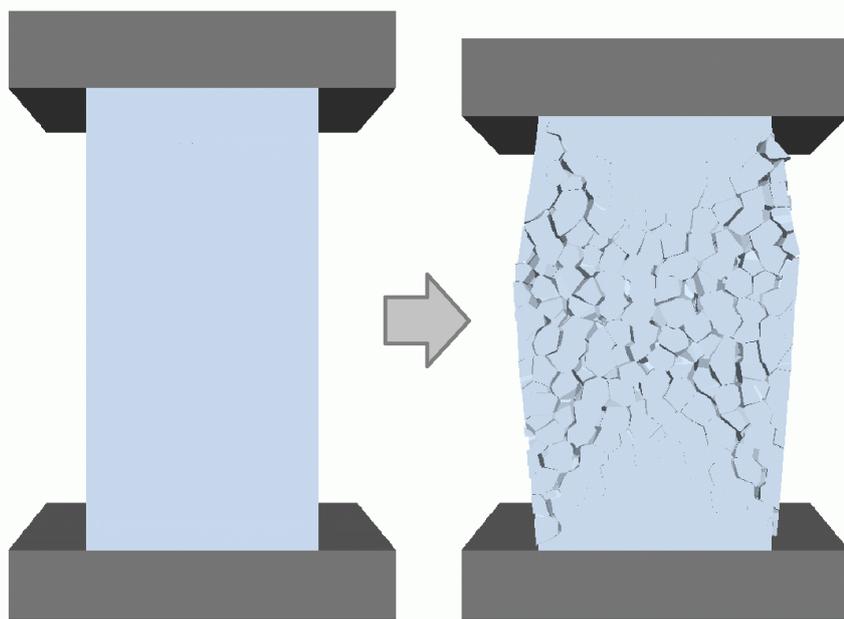


Abb. 7.10: Modellierter Rissbildung im Inneren des Prüfkörpers durch weggeregelte Verformung (Vertikalschnitt).

Schallgeschwindigkeit des Prüfkörpers beschrieben werden (Vgl. Kapitel 5.2). In Analogie zu experimentellen Messungen [63] wurden auch in der diskontinuumsmechanischen Simulation an verschiedenen Verformungsstufen Schallmessungen vorgenommen, indem das Zeitintervall gemessen wurde, in dem ein Scher-Impuls von der Ober- bis zur Unterkante der Probe ausbreitet (Abb. 7.11).

Der Verlauf der Schallgeschwindigkeiten v_s unterstreicht die bisherigen Überlegungen und Beobachtungen zum Schädigungsprozess. Nach einer initialen Phase mit quasi-konstantem v_s folgt mit einsetzender Schädigung nach Überschreitung der Dilatanzgrenze eine allmähliche Reduktion der Schallgeschwindigkeit. Diese Reduktionsrate bleibt zunächst annähernd konstant, bevor beim Erreichen und Überschreiten der Maximalfestigkeit des Prüfkörpers ein noch deutlicher Abfall der Schallgeschwindigkeit zu beobachten ist. Ab etwa 6-7%-Verformung – d.h. also genau im Bereich der Maximalfestigkeit – findet in Übereinstimmung mit den Ergebnissen realer Schallmessungen ein zweiter Übergang statt, nach dem die Schallgeschwindigkeit mit zunehmender Deformation nun noch stärker abnimmt. Somit bestätigt die dynamische diskontinuumsmechanische Simulation durch die explizite Modellierung der Korngrenzen auch aus Sicht der Reduktion der Schallgeschwindigkeiten das experimentell gemessene Verhalten.

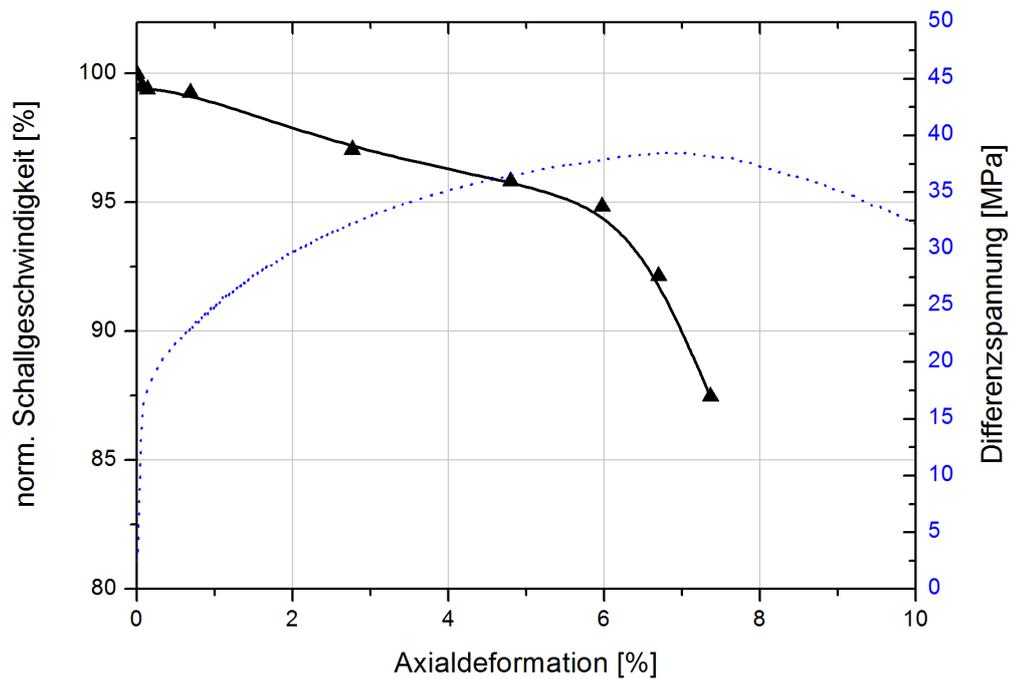


Abb. 7.11: Veränderung der Schallgeschwindigkeiten im Laufe eines triaxialen Druckversuches ($\sigma_3 = 1$ MPa).

7.2.3 Einsetzen intrakristalliner Schädigung im Nachbruchbereich

Wir hatten anhand der Dilatanzentwicklung in den Validierungsergebnissen der Nachrechnung triaxialer Druckversuche an Steinsalzprüfkörpern (Abschnitt 7.2) gesehen, dass sich das Einsetzen der Prüfkörperschädigung infolge der explizit modellierten Rissöffnung entlang der Korngrenzen mit guter Genauigkeit nachbilden ließ. Ebenso wurden die einspannungsabhängige Verfestigung und die Maximalfestigkeiten basierend auf der in Kapitel 5 vorgestellten Parametrisierungsmethode erfolgreich in den Modellrechnungen repliziert.

Im Bereich hoher post-failure-Verformungen kommt es beim Übergang zum quasi-stationären Restfestigkeitsniveau jedoch zu Abweichungen zwischen Experiment und Simulation. Zwar ist dieser Bereich weit im Versagenszustand für die geomechanische Bewertung der Standfestigkeit und Integrität von untertägigen Grubenbauen, Kavernen und anderen denkbaren geotechnischen Aufgabenstellungen nur von sekundärer Bedeutung, jedoch soll im Rahmen dieses ergänzenden Anhangs erörtert werden, welche Effekte hierfür verantwortlich sind und in weiteren Entwicklungsstufen des diskontinuumsmechanischen Simulationsansatzes angegangen werden sollten.

Hierfür schauen wir zunächst auf die Dilatanzentwicklung in einem typischen Triaxialversuch zurück. Wie bereits ausführlich erläutert, findet die Schädigungsentwicklung des Salzgesteins zunächst vorwiegend über die versagenden Korngrenzen als intrinsisches Schwächeflächennetzwerk statt, deren Scher- und Zugfestigkeiten dabei die Festigkeit des Prüfkörpers bestimmen. Das Überschreiten der Dilatanzgrenze führt zur Rissbildung im Prüfkörper, wodurch sich dessen Volumen erhöht, d.h. die Dilatanzkurve steigt an. Durch die zunehmende Rissdichte und Vernetzung der entstandenen Risse erreicht der Prüfkörper bei geringen Einspannungen letztendlich eine Maximalfestigkeit die nachfolgend wieder abnimmt. Im Nachbruchbereich gleiten die Kristalle zunächst aneinander entlang, während sich durch die zunehmende Deformation weitere Risse öffnen, wodurch die Dilatanzkurve zunächst weiter ansteigt (Abb. 7.12, Punkt 2). Bis zu diesem Punkt wird die experimentelle Beobachtung durch die diskontinuumsmechanische Simulation hervorragend nachgebildet.

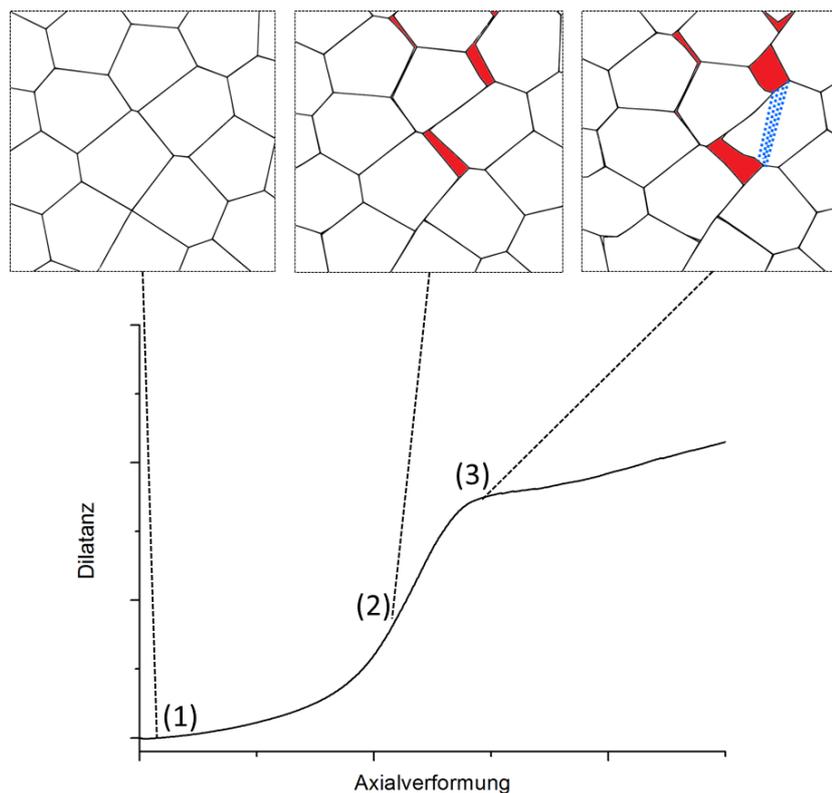


Abb. 7.12: Schematische Darstellung inter- und intrakristalliner Entfestigungsprozesse in Relation zur Dilatanzentwicklung.

Darauffolgend geschieht im realen Prüfkörper jedoch folgendes: Die Restlast wird durch die scherverschiebungsinduzierte Materialauflockerung von immer kleineren Bereichen der Kristalle getragen, wodurch letztendlich eine intrakristalline Entfestigung („Kristallzertrüm-

merung“) einsetzt. Ab diesem Punkt werden kaum noch neue Risse gebildet; stattdessen schert der Prüfkörper durch die Durchtrennung der Kristallen quasi-volumentreu ab (Abb. 7.12, Punkt 3). Im Festigkeitsdiagramm zeichnet sich dieser Bereich durch die Bildung eines konstanten Restfestigkeitsniveaus ab, während die Dilatanzkurve einen deutlich sichtbaren Knick aufweist und die Volumenzunahmen nachfolgend stark vermindert ist.

Leider ist es im derzeitigen Entwicklungsstand von UDEC und 3DEC nicht möglich, die initial erstellten Voronoi-Blöcke infolge von Scher- und Zugbelastungen zu „teilen“, d.h. also die Kristallzertrümmerung adäquat abzubilden. Stattdessen kann man lediglich eine Entfestigung in der Kristallplastizität selbst berücksichtigen, der bis hierhin rein verfestigende Eigenschaften zugeordnete waren. Dies steht in keinem Widerspruch zur in Kapitel 5 vorgestellten Methodik, da diese Entfestigung erst bei sehr starker Kristallverformung (z.B. > 30 %) einsetzt und die diskontinuumsmechanische Abbildung des Prüfkörperversagens über die Rissbildung an Korngrenzen unberührt lässt. Die Schwierigkeiten liegen hierbei eher in numerischen Gesichtspunkten: Um die intrakristallinen Scherbahnen aufzulösen ist eine dementsprechend hohe Vernetzungsdichte notwendig, die zu stark erhöhten Rechenzeiten führt. Darüber wird die numerische Stabilität durch die hohe Kristalldeformation stark strapaziert, da sich die Kristalle nicht in unabhängige Trümmer zerlegen können, sondern dies durch hohe Netzdeformation nachgebildet werden muss.

Dennoch ist es am Beispiel der zweidimensionalen Nachrechnung von Scherversuchen gelungen, zu zeigen, dass die eingehende Überlegungen zu den Ursachen der Unterschiede zwischen Experiment und Simulation bei hohen post-failure-Deformation stimmig und die vorgeschlagenen Maßnahmen zur Lösung des Problems zielführend sind. Nachfolgend werden diese ergänzenden Modellrechnungen dargestellt und erläutert.

Abbildung 7.13 verdeutlicht, wie die prinzipiellen Mechanismen auch im Scherversuch ganz analog zum Triaxialversuch zum Tragen kommen. Nach elastischer Anfangsdeformation und plastischer Verfestigung bilden sich zuginduzierte Risse, die sich zunehmend aufweiten. Die als Scherdilatanz bezeichnete Vertikalverschiebung (die hierbei die analoge Größe zur Dilatanz im Triaxialversuch ist) nimmt in diesem Bereich schädigungsgetrieben zu. Mit zunehmendem Aufgleiten der Kristalle durch Deformation und Rissbildung erreicht die Scherfestigkeit ein Maximum und läuft nachfolgend auf ein Restreibungsniveau. Somit stoppt im Scherversuch das Aufgleiten und die Vertikalverschiebung bleibt nahezu konstant. Diese Dominanz der interkristallinen Korngrenzöffnung über weite Verformungsbereiche

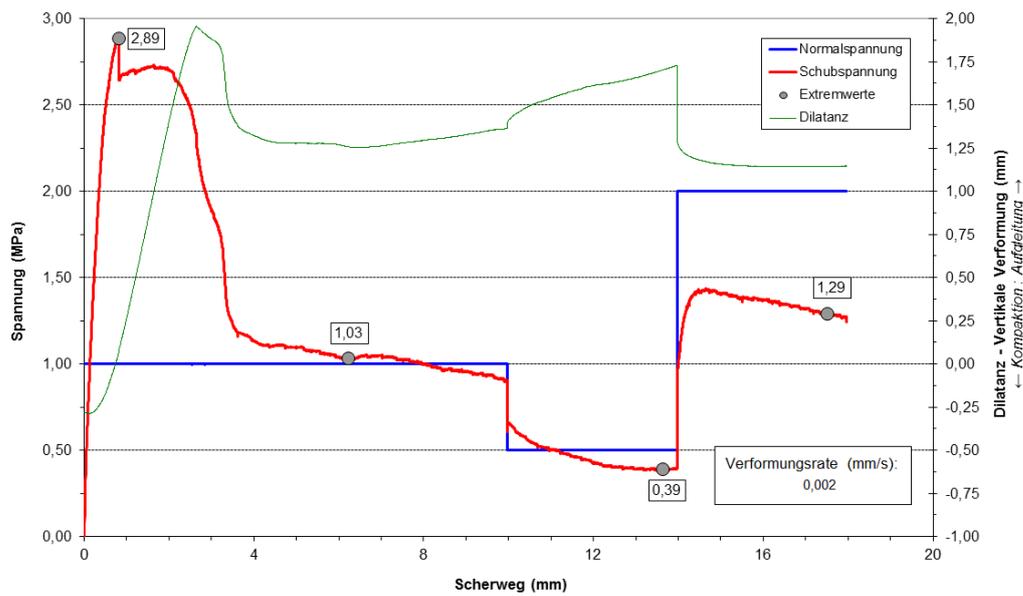


Abb. 7.13: Gemessene Scherspannung und Vertikalverschiebung während eines Scherversuches an homogenem Steinsalz.

und die zusätzliche Entwicklung von intrakristallinen Rissen im Nachbruchbereich wurde bereits in partikelbasierten Simulation ähnlicher Scherversuche nachgewiesen [76].

In unmodifizierten diskontinuumsmechanischen Nachrechnungen dieser Scherversuche treffen wir zunächst auf die gleiche Problematik wie im Triaxialversuch. Nach sehr guter Reproduktion der maximalen Scherfestigkeit und Vertikalverschiebungen bis zum Nachbruchbereich knickt die Scherdilatanz nicht ab, sondern nimmt weiter zu (Abb. 7.14, grüne Kurve). Die Scherlast verteilt sich nun nur noch auf wenige Kristalle, die sich regelrecht zu einem Turm aufrichten und zu weiter Vertikalverschiebung der Probe führen. Dieser Effekt tritt unabhängig von der konkreten Voronoi-Zerlegung und ihrer Diskretisierungsfeinheit auf.

Ergänzt man nun die plastischen Kristalleigenschaften in einer Modifikation um eine Entfestigung ab lokalen plastischen Verformungen von ca. 30% und wiederholt die Simulation, kommt es letztlich zum Durchschneiden der Kristalle und dem erwarteten Abknicken der Dilatanzkurve (Abb. 7.14 und 7.15). Allerdings ist es hierfür auch notwendig, in der Modellierung eine sehr feine Vernetzung der Kristalle anzusetzen, damit die intrakristallinen Scherbänder aufgelöst werden können.

Somit wurden die grundlegenden Überlegungen zu Ursache und möglicher Aufhebung der Diskrepanzen im hochverformten post-failure-Bereich bestätigt. Da diese aufgrund der gegenwärtigen Einschränkungen im Programmcode jedoch mit großem Aufwand

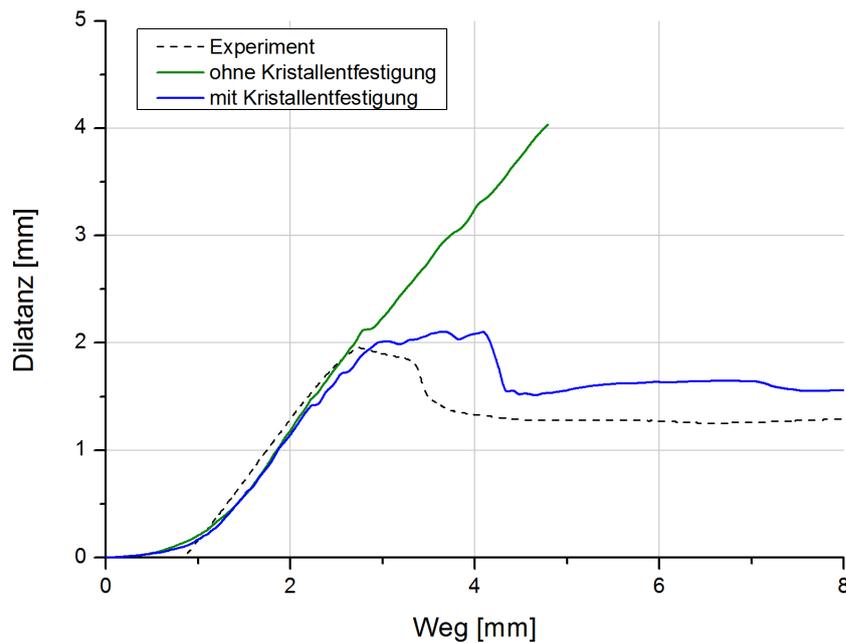


Abb. 7.14: Modellierter Normalverschiebung im Scherversuch im Vergleich zum experimentellen Ergebnis.

einhergehen, muss abgeschätzt werden, ob die Abbildung dieser – anwendungstechnisch als weniger relevant zu charakterisierenden – Effekte für praktische Aufgabenstellungen tatsächlich notwendig ist.

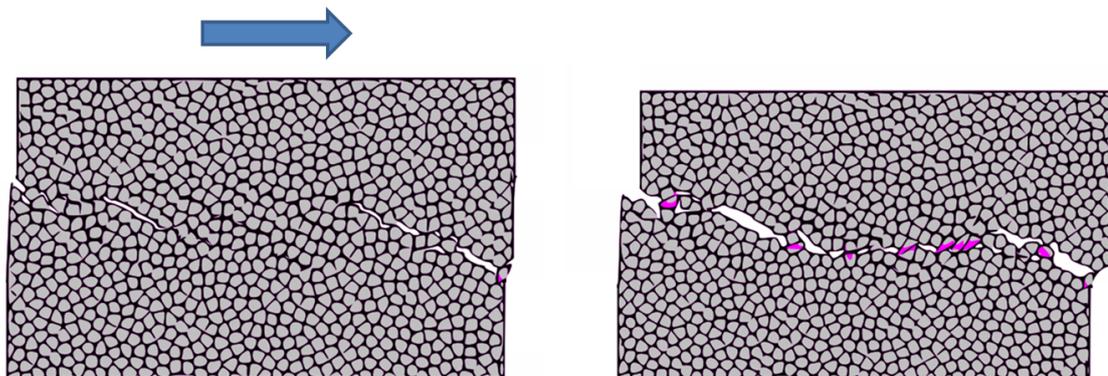


Abb. 7.15: Diskontinuumsmechanische Simulation eines Scherversuches mit sichtbarer Rissbildung und Aufgleiten (links) sowie Durchscheren von Kristallen bei hohen Verformungen (rechts, pinke Bereiche).

Im Rahmen dieser Abschnitte sollte gezeigt werden, dass die diskontinuumsmechanische Modellierung in der Lage ist, die Festigkeit und Schädigungsentwicklung von Salzgesteinen bis in hohe Verformungsbereiche realitätsnah abzubilden und dass die verbleibenden Diskrepanzen im Bereich des späten post-failure Bereiches durch Kristallzertrüm-

mungseffekte hervorgerufen werden. Diese Effekte können aufgrund programmtechnischer Einschränkungen und numerischer Restriktionen nur mit erhöhtem Aufwand berücksichtigt werden, wodurch jedoch die verbliebenen Unterschiede verschwinden. Sollte in zukünftigen Entwicklungsstufen der Programmsysteme UDEC & 3DEC die Zerteilung von Blöcken möglich werden, wird dieser Effekt deutlich einfacher und realitätsnaher abgebildet werden können.

7.3 Pfeilermodelle

7.3.1 Modellaufbau, Randbedingungen und Berechnungsvarianten

Im Rahmen von IfG-Laboruntersuchungen sind Pfeilermodellversuche durchgeführt worden, mit denen ausgehend von einem konstanten Pfeilerquerschnitt und Höhenverhältnis naturnahe Einspannungsverhältnisse im Liegenden bzw. Hangenden der Modellpfeiler über die Fertigung jeweils eines kompletten Modellpfeilers einschließlich eines Sohlen und Firstanschlussstückes realisiert werden sollten. Auch hier waren unterschiedliche Versuchsregimes (kraft- bzw. verformungsgeregelt) realisiert sowie ergänzende Pfeilermodellversuche durchgeführt worden, bei denen zusätzlich zur rein vertikalen Kraftkomponente seitlich eine horizontale Scherkomponente wirkte. Die Pfeilermodelle für die Modellversuche

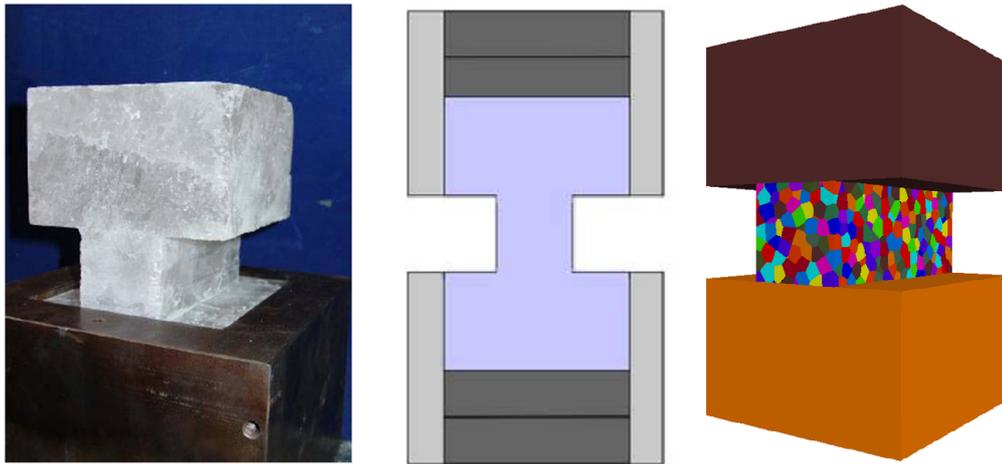


Abb. 7.16: Darstellung des Pfeilermodells und Prinzipskizze der Versuchsanordnung (links, mitte). Diskontinuumsmechanischer Nachbau des Pfeilermodells (rechts).

wurden mittels Heraussägen aus entsprechenden Großblöcken gewonnen. Danach wurden zunächst Quader (Maße $L \times B \times H$: ca. $150 \times 150 \times 200$ mm) mittels Abdrehen auf einer Karusselldrehbank hergestellt. Abschließend wurde mittig der eigentliche Pfeiler durch Herausfräsen seitlicher Vertiefungen hergestellt. Dadurch entstanden komplette Pfeilermodelle mit einem Schlankheitsmaß $\alpha = 1$ und einem Formfaktor $\mu = 0,4$, bestehend aus Steinsalz-Hangendplatte (Maße $L \times B \times H$: ca. $150 \times 150 \times 70$ mm), Steinsalz-Rechteckpfeiler (Maße $L \times B \times H$: ca. $150 \times 60 \times 60$ mm) und Steinsalz-Liegendplatte (Maße $L \times B \times H$: ca. $150 \times 150 \times 70$ mm). Abbildung 7.16 zeigt die resultierende Probenform und den schematischen Versuchsaufbau.

Die IfG-Laborversuche der verformungsgeregelten Belastung des Pfeilermodells (Abb. 7.18, blaue Kurve) zeigten eine quasielastische Anfangsverformung mit Übergang zu einer flacher werdenden Kurve infolge zunehmender Verfestigung. Nach ca. 10% Verformung wurde ein Tragfähigkeitsmaximum in der Größenordnung von $\sigma_1 = 45$ MPa erreicht, das trotz fortschreitender Verformung bis zum Erreichen der vorgegebenen Endverformung bei $\epsilon_V = 25\%$ erhalten blieb und durch das Breitfließen des Pfeilers und die Stützwirkung der Abschalungen sogar wieder leicht anstieg. Hier zeigte sich ein wesentlicher Unterschied zum zylindrischen Pfeilerversuch. Das makroskopische Schädigungsbild zeigte die Entwicklung von großräumigen Abschalungen, wobei im Zentrum ein intakter Pfeilerkern erhalten blieb.

Zur Untersuchung des Einflusses eines deviatorischen Spannungsfeldes auf die Pfeilertragfähigkeit wurden im Labor zusätzlich Pfeilermodelle bei gleichzeitiger vertikaler Belastung horizontal belastet. Das entsprechende Diagramm des Versuchsverlaufes mit den Spannungs-Dehnungskurven für die vertikale und horizontale Belastungskomponente ist in Anhang A.5 dargestellt. Qualitativ ergibt sich bei einer gleichzeitigen Kraftbeaufschlagung in vertikaler und horizontaler Richtung zunächst die klassische Spannungsdehnungskurve. Allerdings ist das Niveau gegenüber der rein vertikalen Krafteinleitung deutlich reduziert, da die seitlich angreifende Horizontalkomponente offenbar eine Verschiebung bewirkt, die zu einem seitlichen Abgleiten der mit der Belastung erzeugten Druckkegeln führt. Als Folge trat ein abrupter Scherbruch des Pfeilers in Querrichtung auf, d. h. parallel zur Schubrichtung (Abb. 7.17).

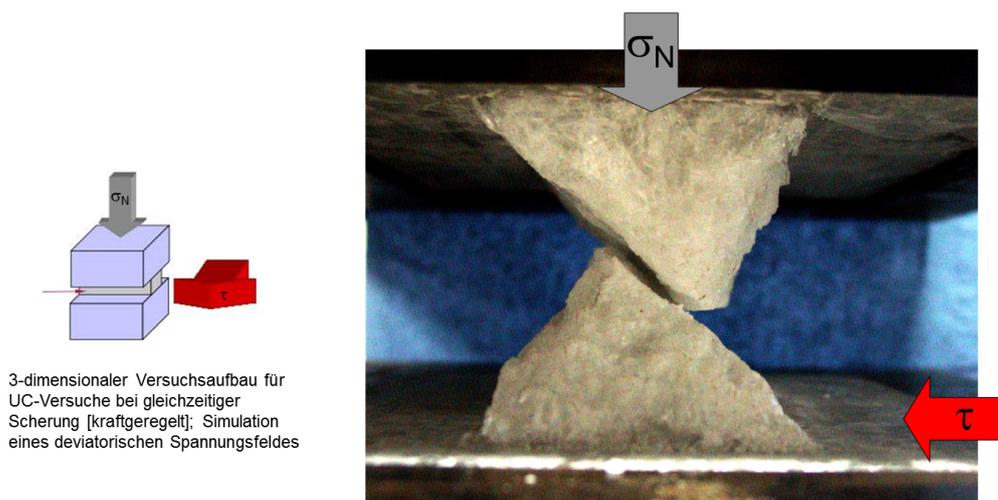


Abb. 7.17: Scherversagen eines Pfeilermodells mit Scherspannungskomponente.

7.3.2 Ergebnisse

Die Simulation des verformungsgeregelten Pfeilermodellversuches unter Verwendung der eingangs abgeleiteten Parameter reproduziert auch für diese Modellgeometrie die essentiellen Charakteristika des Versuchsablaufes (Abbildung 7.18). Auch in der Berechnung

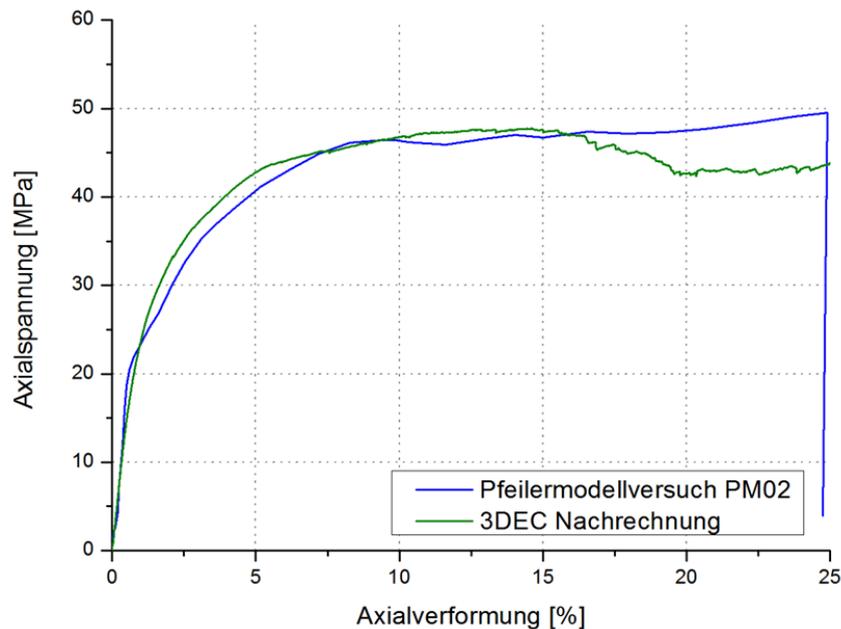


Abb. 7.18: Nachrechnung des Pfeilermodellversuches PM02.

zeigt sich die Abflachung der Tragfestigkeitskurve mit zunehmender Verfestigung und das Erreichen eines stabilen Tragfähigkeitsmaximums von ca. 45 MPa, das bis zu 25% Axialverformung erhalten bleibt. Dabei weist auch das Bruchverhalten eine gute Übereinstimmung zu den experimentellen Beobachtungen auf; angefangen von kleineren Abplatzungen an den Pfeilerkanten bis hin zu großflächigen Abschaltungen entlang der kleinen und großen Seiten des Pfeilers. Nach Entfernung der herausgebrochenen Salzblöcke verbleibt ein noch intakter Pfeilerkern mit charakteristisch sanduhrförmigem Querschnitt, wie er in eben dieser Form auch im Laborversuch zustande kam (Abb. 7.19). Lediglich der leichte Tragfähigkeitsanstieg im Bereich von 15-25% konnte nicht reproduziert werden, was sich wahrscheinlich darauf zurückführen lässt, dass der Stahlrahmen des Versuchsaufbaues nicht explizit modelliert wurde und somit keine Stützwirkung von den Abschaltungen auf den kleinen Seiten des Pfeilers ausgehen konnte. Die Weiterführung der Simulation auf Verformungswerte >25% bestätigt diese Annahme, da es durch das Zusammenpressen der

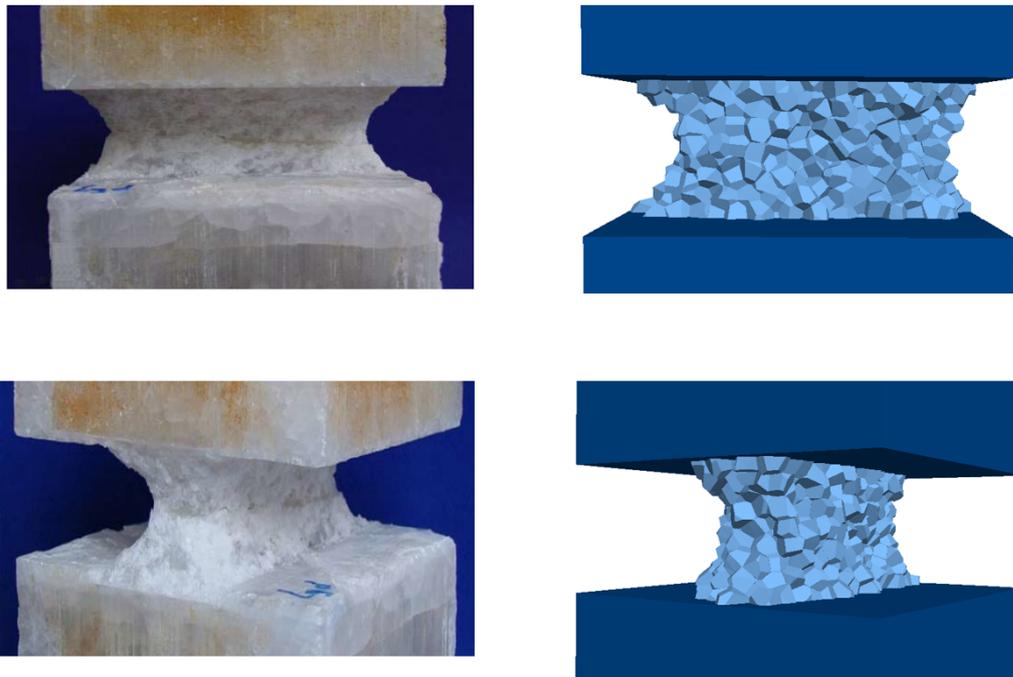


Abb. 7.19: Vergleich der intakt gebliebenen Pfeilerkerne nach Entfernen der Abschalungen bei 25% Verformung..

Abschalungen zwischen Hangend- und Liegendplatte etwas verzögert ebenfalls noch zu einer erneuten Erhöhung der Tragfähigkeit kommt (Anhang A.6).

Im Falle einer zusätzlichen horizontalen Scherkomponente verringern sich auch in den diskontinuumsmechanischen Berechnungen die Tragfähigkeiten des Pfeilers, der in beiden Fällen (Scherspannung jeweils 10% bzw. 20% von σ_N) analog zum Laborversuch durch einen abrupten Scherbruch versagt. Dabei zeigen die erreichten Scherspannungen, Vertikalspannungen und -verformungen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen, d.h. auch die gemischte Belastung mit einer Scherkomponente wird bezüglich der Tragfähigkeitsreduktion und der Bruchdynamik korrekt reproduziert (Anhänge A.7 & A.8).

7.4 Verheilung

Die bisherigen Betrachtungen konzentrierten sich vor allem auf die Dynamik und Lokalisierung der Schädigungsprozesse im belasteten Salzgestein. Als gegenläufiger Prozess wurde bereits in den einleitenden Worten zu den diskontinuumsmechanischen Eigenschaften das Verheilungspotential von Salzgesteinen angesprochen.

Experimentelle Untersuchungen zur Verheilung sind zwar bisher in deutlich geringerem Umfang untersucht worden als die Kriech- und Festigkeitseigenschaften, jedoch existieren verschiedene belastbare Studien, die mit teilweise unterschiedlichen Methodiken zum gleichen Resultat kommen: Wenn eine geschädigte Steinsalzprobe wieder in einen triaxialen, isotropen Spannungszustand gebracht wird, dann schließen sich die interkristallinen Risse und entlang der Korngrenzen werden allmählich wieder Bindungskräfte aktiviert. Dies wurde beispielsweise in [37] anhand von triaxialen Versuchen mit variablem Manteldruck gezeigt. Dabei wurde ausgehend von einer allseitigen, isotropen Einspannung von 30 MPa der Manteldruck bis auf 1 MPa verringert, um eine dilatante Schädigung im Prüfkörper zu erzeugen. Nach dieser Schädigungsphase wurde der Manteldruck wieder auf 30 MPa erhöht und die Probe über einen längeren Zeitraum so stehen gelassen. Während des Versuches wurde die Schädigung sowohl über die Dilatanz als auch über Messungen der Schallgeschwindigkeit von p-Wellen quantifiziert:

$$D = \frac{1}{1 - \varepsilon_{Vol}} \left(\frac{v_p}{v_{p,0}} \right)^2 \quad (7.3)$$

wobei $v_{p,0}$ die p-Wellengeschwindigkeit der ungeschädigten Probe ist. Diese Messgröße steigt wie erwartet an, wenn der Manteldruck verringert wird und nimmt nach Wiedererreichen der isotropen Einspannung allmählich wieder ab, was als Indikator für die eintretende Verheilung des Materials interpretiert wird.

Analoge Beobachtungen wurden auch an künstlich erzeugten Steinsalzgrenzflächen beobachtet [40]. Hierfür wurden zylindrische Steinsalzprüfkörper auf halber Höhe durchgesägt und die Verheilung dieser Grenzfläche unter verschiedenen Lasten und Feuchtigkeitsrandbedingungen beobachtet. Auch in dieser Versuchsanordnung konnte ein Heilungseffekt festgestellt werden, der umso stärker ausfiel, desto höher die Auflast und die Feuchtigkeit war. Offensichtlich spielt die sogenannte „fluid-assisted recrystallization“ [18] also eine große Rolle für den Verheilungsprozess. Ein entsprechender Modellansatz sollte al-

so idealerweise diese Abhängigkeit von Normalspannung und Fluidanteil wiedergeben können.

In Kapitel 2 ist die Verheilung in zwei Stufen eingeteilt wurden: Der Rückgang des Rissvolumens durch Schließung der Risse und die darauffolgende Ausbildung von Bindungskräften auf den neu entstandenen Kontakten zwischen Salzkristallen. In [37] wird die Risschließung zusätzlich in zwei Teilprozesse unterteilt: Eine sogenannte Risschließungsphase 1, in der sich das Rissvolumen durch die ansteigende Mantelspannung verhältnismäßig schnell zurückbildet und eine Phase 2, bei der die noch verbliebenen Risse durch viskoplastisches Fließen und Kriechen bei konstanter Einspannung langsam verschlossen werden. Diese zusätzliche Unterteilung macht den zeitlichen Ablauf des Schädigungsrückganges deutlicher und wird auch in den diskontinuumsmechanischen Verheilungsrechnungen besonders gut zu beobachten sein. Phase 3 enthält dann die Neubildung von Kohäsion und Zugfestigkeit an den Korngrenzen, die nach Risschließung wieder in Kontakt getreten sind (Abb. 7.20).

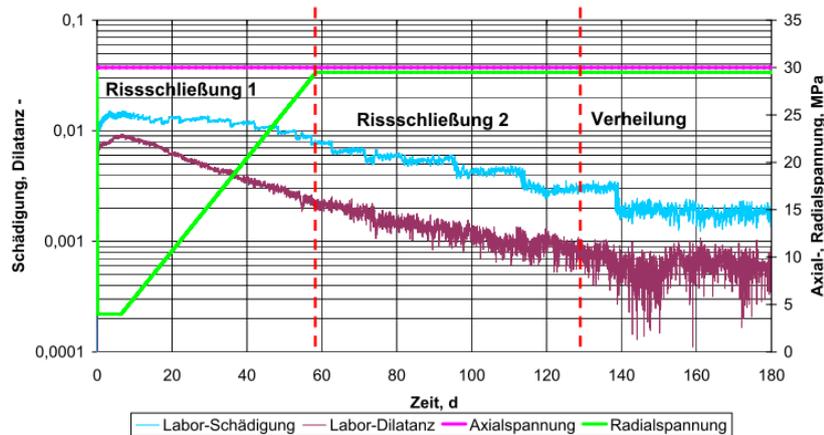


Abb. 7.20: Die Risschließungs- und Verheilungsphasen nach [37] im triaxialen Verheilungsversuch.

Die gesamte Einteilung in Risschließungs- und Rekristallisationsphase suggeriert eine klare Abfolge, die aber streng genommen nur für den individuellen Riss und nicht für das zeitliche Verhalten der Gesamtprobe gilt. Das Experiment beobachtet jedoch immer die Überlagerung einer Vielzahl solcher Prozesse, die zu unterschiedlichen Zeitpunkten einsetzen und auch verschieden schnell wirken. Demnach ist stets Vorsicht geboten, wenn der Versuch gemacht wird, das makroskopische Systemverhalten durch die Beschreibung einer einzelnen Korngrenze zu erreichen.

Um den Verheilungsprozess nun theoretisch beschreiben und numerisch simulieren zu können, sind bereits einige Modellansätze entwickelt worden. Diese setzen der schädigungsbedingten Verformungsrate in der Regel eine gegenläufige Verheilungsrate in Abhängigkeit von Differenzspannungen und aktueller plastischer Verformung entgegen.

Diese Verheilungsansätze entstammen in der Regel kontinuumsmechanischen Überlegungen und müssen daher die verschiedenen Rissschließungsphasen zum Teil separat modellieren. In diskontinuumsmechanischen Berechnungen müssen wir uns dahingegen nicht zusätzlich mit den Rissschließungsphasen 1 und 2 beschäftigen, da diese durch die explizite Darstellung von Korngrenzen ganz automatisch dargestellt werden. Wird die Einspannung erhöht, so schließen sich einige Risse sehr schnell, da die entsprechenden Salzkörner zusammengepresst werden (Phase 1). Durch das visko-plastische Verhalten der Kristalle schließen sich dann im längeren Verlauf die noch verbleibenden Risse (Phase 2). Für die diskontinuumsmechanische Berechnung muss also lediglich ein funktionaler Zusammenhang für die „eigentliche“ Verheilung (d.h. die Rekristallisation und Ausbildung von neuer Kohäsion und Zugfestigkeit an Korngrenzen) ermittelt werden.

Leider ist es gerade dieser Prozess, der vor allem über lange Zeiten agiert und für den daher kaum experimentelle Daten bezüglich des zeitlichen Ablaufs der Entstehung neuer Korngrenzbindungen existieren. Anhand der Beobachtungen in [40] können wir jedoch zumindest einen einfachen Verheilungsansatz implementieren, der die grundlegenden Abhängigkeit bei gleichzeitig möglichst geringer Parameterzahl beinhaltet. Wir gehen davon aus, dass sich für eine Korngrenze bei kompressiver Normalspannung σ_N (und nur dann) eine Erholungsrate für die Kontaktparameter Haftreibung $\Delta\mu$, Kohäsion und Zugfestigkeit proportional zur aktuellen Differenz zum ungeschädigten Maximalwert einstellt. Das heißt am Beispiel der Kohäsion c :

$$\frac{\delta c(t)}{\delta t} = 2\pi [c_{Max} - c(t)] \cdot \frac{\sigma_N}{\tau_H} \quad (7.4)$$

wobei die Proportionalitätskonstante τ_H als eine „Verheilungszeit“ interpretiert werden kann.

Durch Integration erhält man – für konstantes σ_N – den funktionalen Zusammenhang für den zeitabhängigen Aufbau der Kohäsion dann zu:

$$c(t) = c_{Max} \cdot \left[1 - \exp\left(-\sigma_N \frac{2\pi t}{\tau_H}\right) \right] \quad (7.5)$$

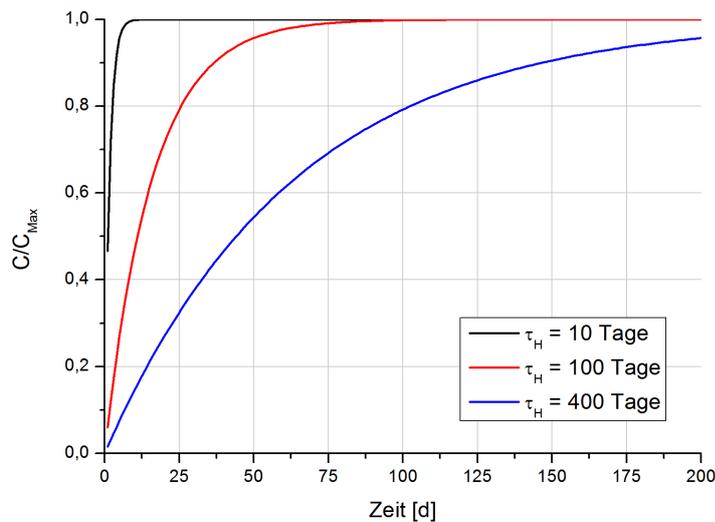


Abb. 7.21: Zeitabhängiger Aufbau der Kohäsion nach Gl. 7.5 für verschiedene Verheilungszeiten τ_H und $\sigma_N = 1$ MPa.

Dieser Verheilungsansatz wurde im Schichtflächenmodell implementiert und seine Funktionalität zunächst an Simulationen von Scherversuchen verifiziert [77]. Für den Scherversuch wurde eine Einzelschicht zwischen zwei Blöcken (Abb. 4.4) modelliert und der Versuchsablauf des typischen weggeregelten Scherversuchs leicht modifiziert. Zunächst ist ein normaler Scherversuch gefahren worden, d.h. die Schichtfläche wurde mit einer Auflast von 1 MPa belastet, der obere Block mit konstanter Geschwindigkeit relativ zum festgehaltenen unteren Block bewegt und die Scherspannung in Abhängigkeit des Scherweges simuliert (Abb. 7.22). Es zeigt sich der erwartete Haftreibungsspeak, nach dessen Erreichen die Scherspannung auf ein Restreibungsniveau abfällt. Nach diesem ersten Scherversagen wurde die Scherbewegung gestoppt und dann zugelassen, dass die Festigkeitsparameter der Kontaktfläche gemäß Gl. (7.5) wieder zeitabhängig ansteigen, bevor der Scherversuch erneut durchgeführt wurde. Ohne diese Verheilung verbleibt die Scherspannung auf dem Restreibungsniveau, während bei vollständiger Verheilung wieder der gleiche Spannungsverlauf wie im ersten Scherversuch erscheint. Eine partielle Verheilung mit einem abgeschwächten Haftreibungsspeak ließ sich ebenfalls erfolgreich abbilden.

Nachdem die Funktionalität des implementierten Verheilungsansatzes bestätigt werden konnte, sollte nun eine qualitative Demonstration des Verheilungseffektes am Beispiel der triaxialen Schädigung und Verheilung von zylindrischen Steinsalzproben folgen. Der Probenkörper entspricht dabei dem Voronoi-Modell aus den ein- und triaxialen Druckver-

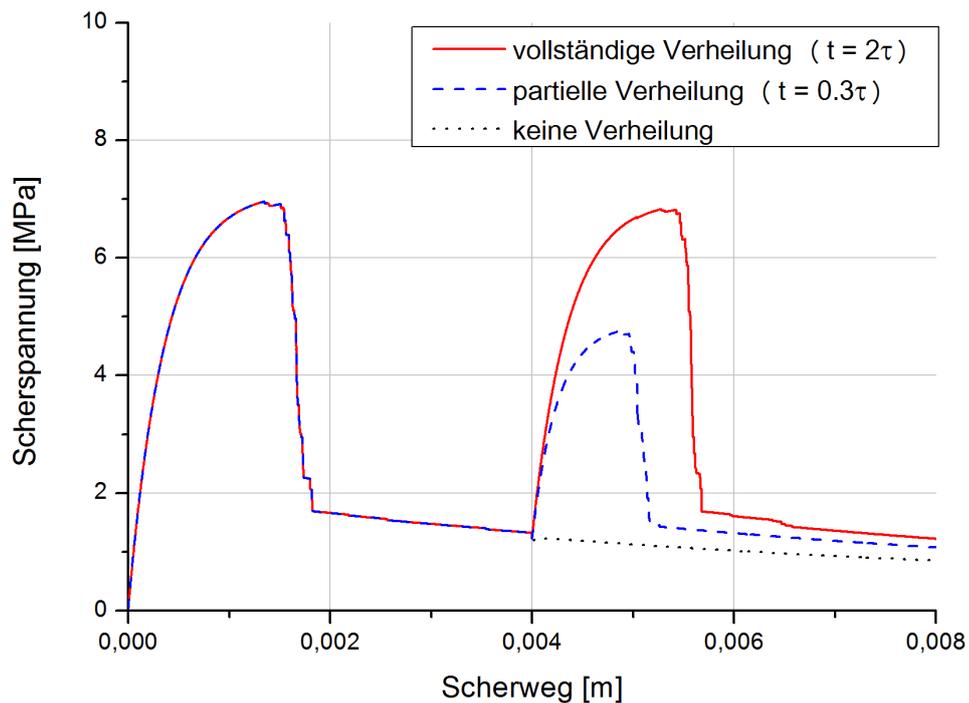


Abb. 7.22: Scherspannungsverlauf eines mehrstufigen Scherversuches bei verschiedenem Grad der Verheilung.

suchen (Abschnitt 7.1 und 7.2) mit gleicher Parametrisierung (Anlagen B.1 & B.2). Dieser wird zunächst bei einer triaxialen Einspannung von 1 MPa weggeregelt bis 8% Axialverformung gefahren, bevor eine elastische Entlastung erfolgt. In diesem entlasteten Zustand wird eine längere Standzeit ($t \approx \tau_H$) unter erhöhter isotroper Einspannung modelliert, in der druck- und zeitabhängig durch Kriechen und Aufbau von Kohäsionsbindungen eine Verheilung einsetzen kann. Nach dieser Verheilungsphase wird der verformungsgeregelte Versuch weitergeführt. Analog wurde der gleiche Ablauf in einer Vergleichssimulation angesetzt, jedoch ohne Verheilung der Korngrenzen. Ohne diesen Verheilungsanteil fährt die Versuchskurve bei Wiederaufnahme der weggeregelten Verformung auf das vorherige Spannungsniveau und entfestigt weiter (Abb. 7.23, schwarze Kurve). Dahingegen zeigt die Simulation unter Berücksichtigung von Verheilungseffekten, dass nun wieder ein höheres Spannungsniveau erreicht wird, die zwar nicht bis an die ursprüngliche Maximalfestigkeit heranreicht, aber zumindest eine teilweise Verheilung andeutet (Abb. 7.23, blaue Kurve). Für eine vollständige Heilung hätte eine längere Standzeit höherer Einspannung modelliert werden müssen.

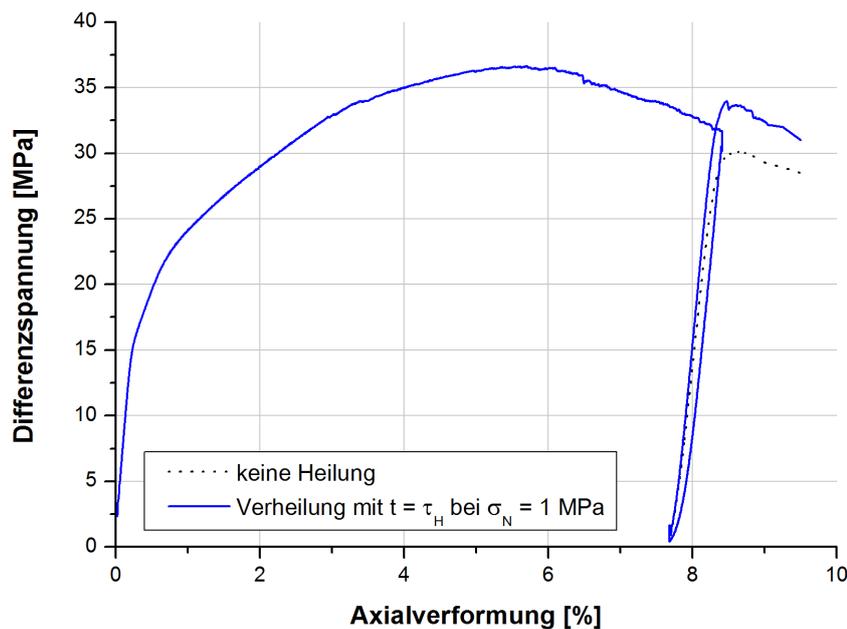


Abb. 7.23: Simulation von Verheilungseffekten in einem triaxial eingespannten Prüfkörper.

Im Rahmen des diskontinuumsmechanischen Ansatzes ist es also bereits mit einer einfachen qualitativen Verheilungsrelation möglich, den Wiederaufbau von Kohäsionskräften abzubilden. Die Aktivierung von Kohäsionskräften im post-failure Bereich von Salzgesteinen läßt sich physikalisch dadurch erklären, dass die Grenzflächen an den Kontaktstellen eine gegenüber den Bruchflächen reduzierte Oberflächenenergie besitzen, aus der eine Anziehungskraft – die Haftreibungskraft – resultiert [78]. Einen anschaulichen Beleg für die Aktivierung von Kohäsionskräften liefern die an den Bruchflächen fest aneinander haftenden Prüfkörperhälften von Salzgesteinen nach einem Triaxialversuch. Zu ihrer Überwindung müssen Zugkräfte aufgebracht werden, vergleichbar denen beim Zerreißen intakter Salzgesteine [79].

7.5 Hydro-mechanisch gekoppelte Berechnungen

7.5.1 Extensionsversuche unter Fluiddruckbelastung

Nachdem das Materialverhalten unter mechanischer Belastung unter den verschiedensten Randbedingungen und Geometrien erfolgreich mit der diskontinuumsmechanischen Methode abgebildet werden konnte, wird nun der Schritt zur Nachrechnung hydro-mechanisch gekoppelter Laborversuche unternommen. Wir betrachten hierfür zunächst einen Extensionsversuch, der die hydraulische Dichtheit des Steinsalzes bis zur Perkolationschwelle eindrucksvoll unterstreicht [80]: Ein zylinderförmiger Prüfkörper wird in einem triaxialen Spannungsfeld bei einem Manteldruck von 20 MPa und Axiallast von 15 MPa eingespannt. Zusätzlich wird über eine Bohrung im Zentrum der Probe ein Fluiddruck von 15 MPa aufgebracht (Abb. 7.24). Da der Fluiddruck die minimale Einspannung nicht übersteigt, ist dies zunächst ein Zustand ohne jegliche Fluidperkolation, d.h. das Steinsalz ist unter diesen Bedingungen fluiddicht.

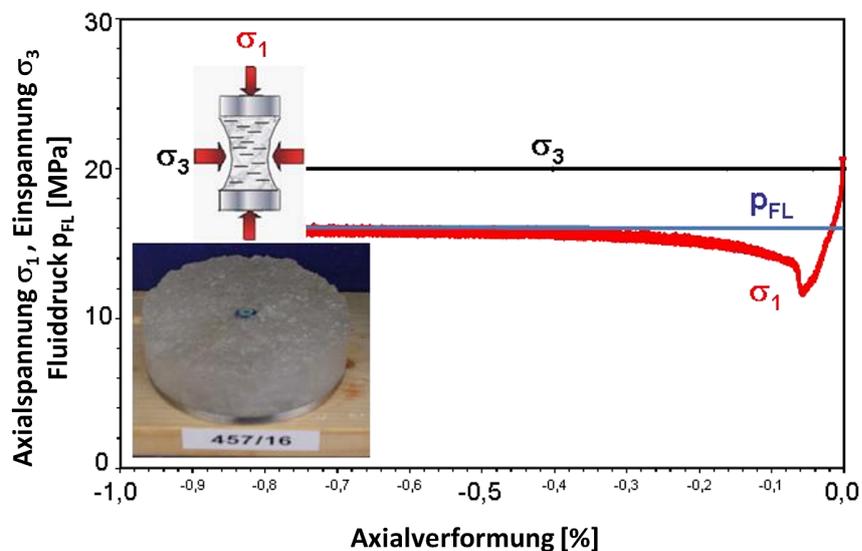


Abb. 7.24: Extensionsversuch unter hydraulischem Druck.

Bei konstant bleibendem Fluiddruck wird nun die Axialspannung langsam verringert, wodurch die minimale Hauptspannung unter den angreifenden Fluiddruck sinkt. Demzufolge kommt es zu einer druckgetriebenen Fluidperkolation und zur Ausbildung von horizontal gerichteten Rissen senkrecht zur minimalen Hauptspannung, die den Prüfkörper schließlich durchtrennen (Abb. 7.24). Dieses Experiment demonstriert zwei wichtige Charakteristiken von Steinsalz unter hydro-mechanischer Belastung: Die Dichtheit bis zur Überschreitung

der Perkolationsschwelle und die spannungsabhängige Ausbreitungsrichtung des Fluides. Beide Effekte müssen also auch durch die diskontinuumsmechanische Modellierung abgebildet werden, um das Materialverhalten korrekt reproduzieren zu können.

Hierfür wurde der Versuchsaufbau sowohl in 2D (UDEC) als auch in 3D (3DEC) nachgebildet. Die zentrale Bohrung wird durch einen axialen Riss modelliert, an dem die Druckrandbedingung für die Simulation angelegt wird. Die hydraulische Simulation erfolgt dabei im „steady-state“-Verfahren, das den Zeitschritt für die Fluidberechnung auf Kosten einer realen Zeitskala optimiert, indem Kontaktpermeabilitäten und Domänenvolumina automatisch gewählt und angepasst werden. Dies entspricht einer sehr schnellen Ausbreitung, in der das Fluid stets in der Lage ist, die zur Verfügung stehenden geöffneten Korn-grenzen bis zum nächsten mechanischen Berechnungsabschnitt auszufüllen. Demzufolge eignet sich dieser Algorithmus nicht für die Nachbildung der exakten Zeitabhängigkeit der Fluidausbreitung, ermöglicht dafür aber die schnelle und effiziente Nachbildung des qualitativen hydraulischen Verhaltens bezüglich der Ausbreitungsrichtung und des Einsetzens ab Überschreitung der Perkolationsschwelle. Der Extensionsversuch wird dann durch die weggeregelter Entlastung der oberen Druckplatte ausgeführt. Die verwendeten Stoffmodellparameter entsprechen denen aus Abschnitt 7.1 (Anlagen B.1 & B.2).

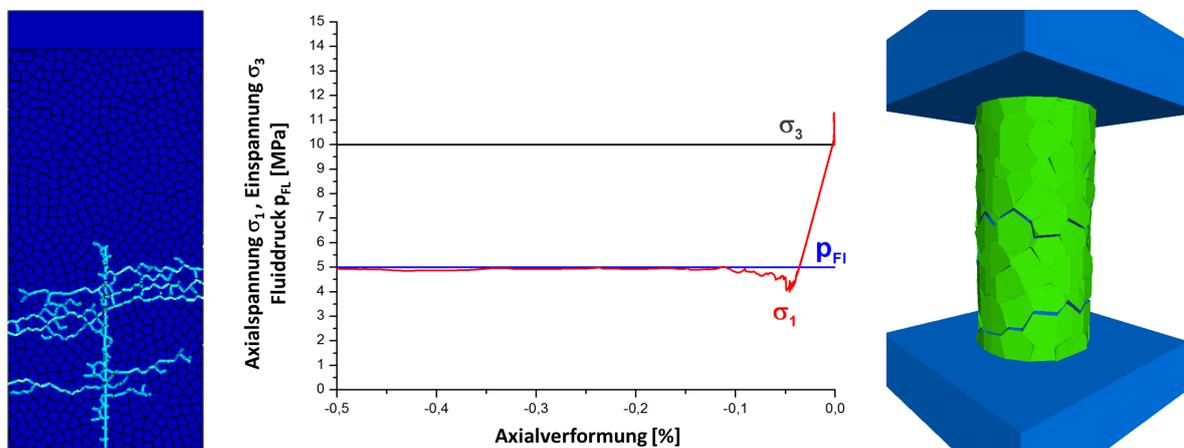


Abb. 7.25: Nachrechnung des Pfeilermodellversuches PM02.

Die Simulationsergebnisse reproduzieren das qualitative und quantitative Materialverhalten des Laborversuches sowohl in der zwei- als auch der dreidimensionalen Modellierung (Abb. 7.25). Der Prüfkörper ist solange dicht, bis die minimale Hauptspannung ca. 1 MPa unter dem angreifenden Fluiddruck liegt, woraufhin eine Perkolation in horizontaler Orientierung einsetzt, die schließlich den Prüfkörper komplett durchdringt.

7.5.2 Abhängigkeit der Ausbreitungsrichtung vom Spannungsfeld

Nachdem der Laborversuch erfolgreich nachgebildet werden konnte, wurde das Modell für eine weitere Demonstration der Spannungsabhängigkeit der Fluidausbreitung leicht modifiziert. Hierfür wurde der Prüfkörper für zwei Vergleichsimulationen zunächst in zwei verschiedene anisotrope Spannungszustände gebracht, bei denen die minimale Hauptspannung jeweils einmal in horizontaler und vertikaler Richtung orientiert ist. Anstelle einer Extensionsverformung wird nun der Fluiddruck in der Bohrung erhöht, bis die minimale Einspannung überschritten wird. Wir erwarten dann die Einsetzung der Perkolation, die jeweils senkrecht zur minimalen Hauptspannungen und damit parallel zur maximalen Hauptspannung orientiert ist. Die Berechnungen bestätigen diese Überlegungen (Abb. 7.26) und unterstreichen somit die Fähigkeit des diskontinuumsmechanischen Ansatzes, die spannungsabhängige Ausbreitungsrichtung der Perkolation explizit zu erfassen. Das Simulationsergebnis bestätigt darüber hinaus die Beobachtungen aus analogen Laborversuchen der Fluidausbreitung in triaxial eingespannten Prüfkörpern [81] (Anlage A.9).

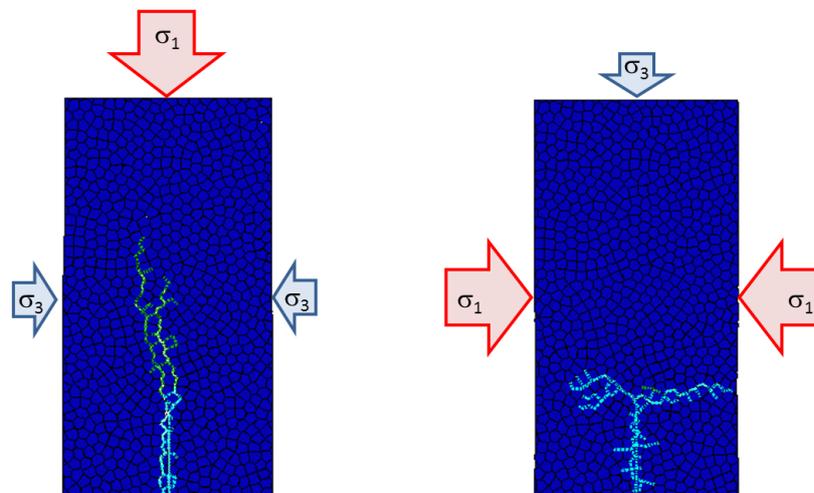


Abb. 7.26: Spannungsabhängigkeit der Perkulationsrichtung nach Überschreitung der minimalen Hauptspannung.

Vor dem Hintergrund des konventionellen Minimalspannungskriteriums ist an dieser Stelle darauf hinzuweisen, dass diese explizite Modellierung durch die Berücksichtigung der Richtungsabhängigkeit dazu beitragen kann, genauere und weniger konservative Aussagen zu Integrität salinärer Barrieren zu machen. Die Anwendung des Minimalspannungskriteriums auf die Beispiele in Abb. 7.26 hätte eine Verletzung über den gesamten

Prüfkörper ergeben, da der Fluiddruck bei Einsetzen der Perkolation stets höher ist als die minimale Einspannung der Probe. Dabei macht es der Spannungszustand im Fall (b) jedoch unmöglich, dass sich das Fluid in vertikaler Richtung bewegt. Die Auswertung des Minimalspannungskriteriums ist daher sehr konservativ, da es lediglich bewerten kann, ob eine Perkolation an einem bestimmten Punkt in irgendeine Richtung stattfinden könnte, wenn sich dort ein Fluid befände. Für die Bewertung, ob Gase oder Flüssigkeiten unter den gegebenen Einspannungszuständen sich überhaupt bis zu diesem Punkt bewegen können, muss jedoch eine explizite hydro-mechanisch gekoppelte Berechnung erfolgen; insbesondere da der lokale Spannungszustand stark von der gegenwärtigen Fluidverteilung und deren Druck abhängen kann.

7.5.3 Winkelabhängigkeit der Rissöffnung an Konturbereichen

Im Zusammenhang mit der zufallsverteilten Generierung der Pseudo-Kristallstruktur folgt, dass die Korngrenzen an Konturbereichen von Hohlräumen und anderen Übergängen im Allgemeinen nicht senkrecht zur Oberfläche stehen werden. Während die unregelmäßige Korngrenzstruktur ein essentieller Bestandteil für die spannungsfeldabhängige Modellierung der Fluidperkolation ist, ergibt sich aber die Frage, ob das anfängliche Einsetzen der druckgetriebenen Perkolation an der Kontur möglicherweise vom jeweiligen Winkel der Korngrenze abhängt. Abb. 7.27 zeigt im zweidimensionalen Fall eine schematische Nahaufnahme einer Korngrenze, die in einem Winkel α zur Modellbegrenzung steht, an der ein Fluiddruck p_{FL} wirkt. Auf das System wirkt zusätzlich sowohl eine horizontale Einspannung σ_{xx} von den Seiten und eine vertikale Fernfeldkomponente σ_{yy} .

Derartig isolierte Spannungszustände lassen für theoretische Überlegungen leicht vorstellen, aber nur schwierig numerisch modellieren, da einerseits allseitige Spannungsrandbedingungen zur Bewegung des Gesamtmodells führen können und andererseits im Konturbereich typischerweise zahlreiche wechselwirkende Effekte durch lokale Entspannung und Schädigung konkurrieren. Wir können an diesem System jedoch zunächst folgende Überlegungen anstellen:

Nahe der Kontur entspricht die vertikale Spannungskomponente dem angreifenden Fluiddruck p_{FL} . Gleichzeitig verringert der Fluiddruck die Normalspannung auf der Korngrenze. Somit lässt sich die effektive Normalspannung σ_N^{Eff} im vorliegenden Spannungsfeld folgendermaßen beschreiben (kompressive Spannungen hier positiv, keine Scherspan-

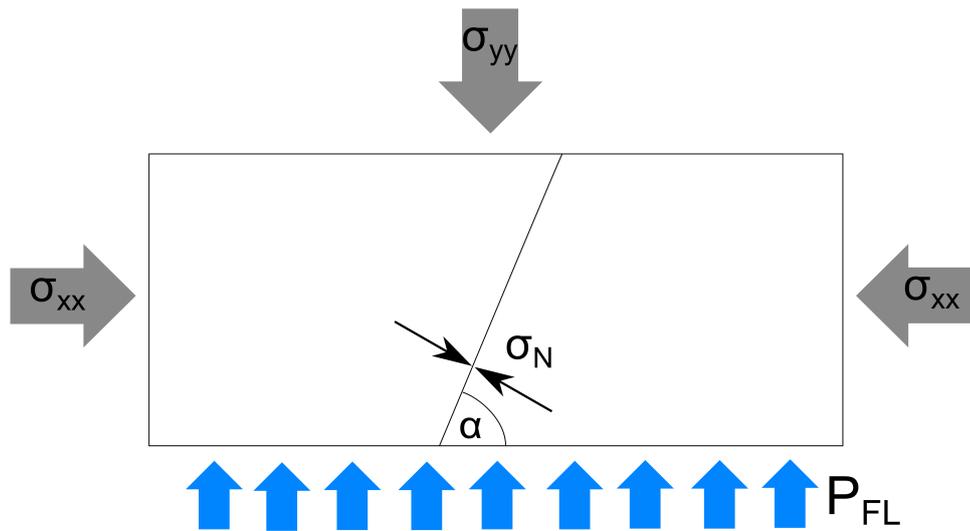


Abb. 7.27: Schematische Darstellung einer Korngrenze im Winkel α zur Kontur.

nung τ_{xy}):

$$\sigma_N^{Eff} = \sigma_{xx} \cdot \sin^2 \alpha + p_{FL} \cdot \cos^2 \alpha - p_{FL} \quad (7.6)$$

und damit

$$\sigma_N^{Eff} = (\sigma_{xx} - p_{FL}) \cdot \sin^2 \alpha \quad (7.7)$$

Da wir in vorliegenden Untersuchungen stets davon ausgehen, dass keine hydraulische Zugfestigkeit vorliegt und demnach die druckgetriebene Perkolation genau dann einsetzt, wenn $\sigma_N^{Eff} \leq 0$, folgt aus Gl. (7.7) unmittelbar, dass dies unabhängig von α stets dann geschieht, wenn $\sigma_{xx} \leq p_{FL}$. Aus diesen rein strukturellen Überlegungen ist also nicht von einer Winkelabhängigkeit auszugehen.

Mit einer kleinen Modifikation der Randbedingungen können wir das System aus Abb. 7.27 zur numerischen Verifikation der Gültigkeit von Gl. (7.7) einsetzen: Da die Vertikalspannung an der Kontur näherungsweise dem aufgebracht Fluidruck entspricht, ersetzen wir die äußere Spannungsrandbedingung σ_{yy} durch eine vollständige Fixierung in y -Richtung. Zusätzlich wird im Zentrum der oberen Modellbegrenzung noch in x -Richtung fixiert, um eine mögliche Verschiebung des Gesamtmodells entlang der x -Achse zu unterbinden. Ausgehend von einer horizontalen Einspannung von 5 MPa wird in dem in Abb. 7.28 zusammengefassten Modell an der Unterkante schrittweise ein ansteigender Fluidruck gemäß der vorherigen Überlegungen aufgebracht und in Abhängigkeit des Anstellwinkels α der idealisierten Korngrenze deren effektive Normalspannung σ_N^{Eff} aufgezeichnet. Die zugrundeliegenden Matrix- und Kontaktparameter sind in Tabelle 7.2 zusammengefasst.

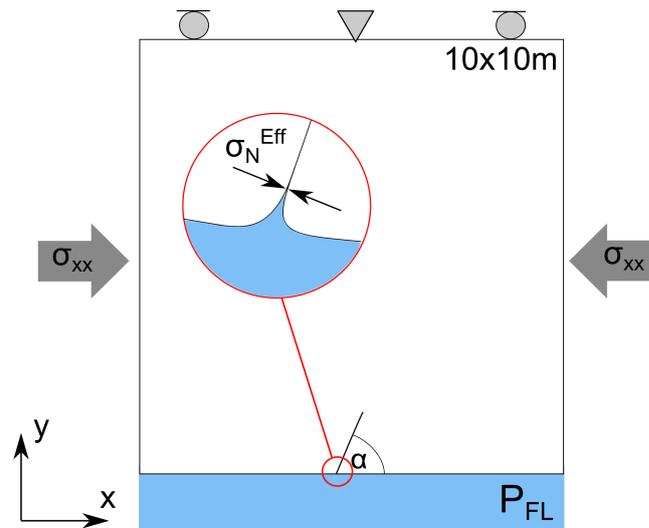


Abb. 7.28: Modellaufbau und Randbedingungen für die numerische Studie zur winkelabhängigen Normalspannung einer Konturkluft unter angreifendem Fluiddruck.

Es werden für die Kontakte sehr hohe Festigkeiten angesetzt, da hier lediglich die Normalspannungsentwicklung als Funktion von Fluiddruck und Winkel untersucht werden soll. Abb. 7.29 zeigt die Resultate der ergänzenden numerischen Studie für drei verschiedene

Matrixparameter (elastisch)		Kontaktparameter (elastisch)	
Dichte [kg/m^3]	2160	Normalsteifigkeit k_N [MPa/m]	10^6
Kompressionsmodul K [GPa]	18	Schersteifigkeit k_S [MPa/m]	$2 \cdot 10^5$
Schermodul G [GPa]	12		

Tab. 7.2: Materialparameter zur Untersuchung der Winkelabhängigkeit der Normalspannung auf Kluftflächen entlang einer Hohlraumkontur unter angreifendem Fluiddruck.

Risorientierungen im Vergleich zur analytischen Vorhersage gemäß Gl.(7.7). Es zeigt sich eine deutliche Übereinstimmung mit den theoretischen Überlegungen, insbesondere im Bezug auf den Punkt, an dem der Fluiddruck die horizontale Einspannung kompensiert. Bei der Modellierung einer druckgetriebenen Rissöffnung bei genau $\sigma_N \leq p_{FL}$ ist also keine Winkelabhängigkeit des Eindringens zu beobachten. Aufgrund der unterschiedlichen Anstiege wäre dies für den Fall einer zusätzlichen hydraulischen Zugfestigkeit i.A. jedoch der Fall und somit gegebenenfalls gesondert zu betrachten. Allerdings sei angemerkt, dass sich diese Abhängigkeit einzig und allein aus dem Spannungstensor in der Geometrie der diskreten Fließwegstruktur polykristalliner Gesteine ergibt und demnach also weniger eine rein numerische Problematik als vielmehr eine direkte Folge der Grundannahmen zur Perkolations auf Korngrenzen ist.

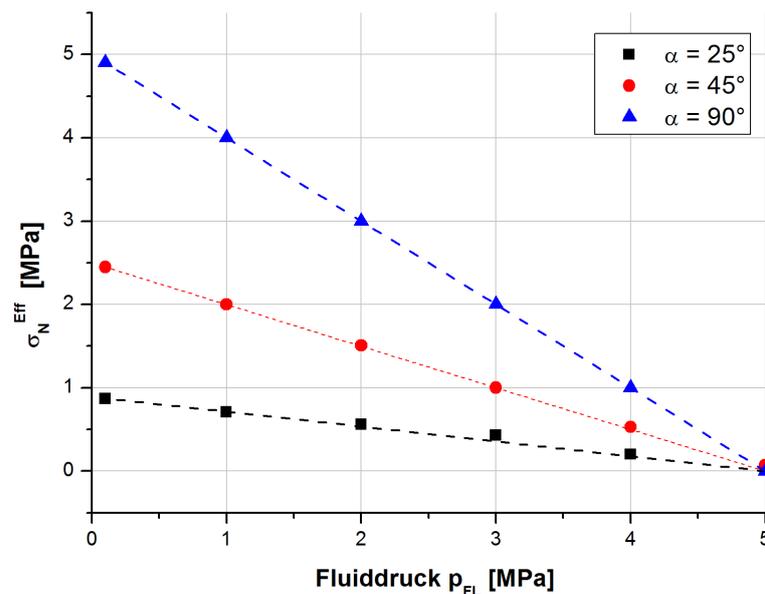


Abb. 7.29: Abhängigkeit der effektiven Normalspannung einer Konturkluft in Abhängigkeit von dem Anstellwinkel. Theoretische Vorhersage nach Gl.(7.7) gestrichelt.

Wenn wir annehmen, dass das Salzgestein als polykristallines Diskontinuum mit Korngrenzen auf unregelmäßig geformten Polyederflächen agiert, müsste man schließen, dass bei einer hydraulischen Zugfestigkeit σ_T^{Hyd} auch in-situ eine solche Winkelabhängigkeit existiere. Es mag dabei argumentiert werden, dass in der realen Kontur aufgrund der geringen Größe der Salzkristalle stets zahlreiche Korngrenzen in der günstigsten Orientierung (senkrecht zur Kontur) vorliegen und somit obige Diskussion lediglich eine Folge der notwendigen Vergrößerung in der numerischen Modellierung wäre. Allerdings wäre dem unter Verweis auf die Strukturanalyse in Abschnitt 4.3.3 entgegenzuhalten, dass bereits nach wenigen Korndurchmessern eine signifikant abweichende Korngrenzorientierung zu erwarten ist, wodurch die Fragestellung lediglich einige Milli- bis Zentimeter in die Kontur verschoben wird, wo noch immer näherungsweise die gleichen Spannungsbedingungen wie an der Kontur selbst herrschen.

Für eine diskontinuumsmechanische Konturmodellierung mit Voronoi-Elementen bedeutet dies, dass die makroskopisch beobachtete Perkolationschwelle etwas höher als die angesetzte mikroskopische Zugfestigkeit liegen würde. Es bleibt aber festzuhalten, dass im Rahmen dieser Arbeit stets keine hydraulische Zugfestigkeit für die hydro-mechanisch gekoppelten Berechnungen angesetzt wurde, und somit nicht von einer Winkelabhängigkeit im Konturgebiet auszugehen ist, d.h. die Fluidperkolation setzt stets genau dann ein, wenn der angreifende Fluiddruck die wirkende Normalspannung überwindet.

Insgesamt sollte jedoch erneut betont werden, dass unter realen Bedingungen im Konturbereich durch Scherverformungen und Kriechprozesse weitaus komplexere Wechselwirkungen auftreten, so dass in diesem Bereich häufig bereits durch schädigungsinduzierte Rissöffnung ein Perkolationsprozess initiiert wird. Wenn dies nicht der Fall ist, sichert Gl. (7.7) jedoch zu, dass der rein fluiddruckgetriebene Mechanismus winkelunabhängig startet. Nichtsdestotrotz sollte die gekoppelte diskontinuumsmechanische Modellierung aufgrund ihrer strukturellen Komplexität weiterhin stets auf Plausibilität geprüft und anhand von Laborversuchen umfassend validiert werden.

Kapitel 8

Praktische Anwendungen

8.1 Standfestigkeit im Kammer-Pfeiler-Abbau

8.1.1 Aufgabenstellung

Als erste Aufgabenstellung wird ein Abbaufeld bei offenem Kammerbau mit rechteckigen Pfeilern untersucht. Der konkrete Standort wird aus Gründen betrieblicher Geheimhaltung im Rahmen dieser Studie nicht näher präzisiert. Ebenso werden anstatt von konkreten Senkungswerten und -raten jeweils prozentuale Angaben in Bezug auf den Maximalsenkungsbetrag am Ende des Berechnungszeitraum angegeben.

Während des Abbaus wurden im Feld keine Besonderheiten im mechanischen Gebirgsverhalten festgestellt. Mehrere Jahre nach Abbaubeginn wurde jedoch eine signifikante Zunahme der Senkungen an der Tagesoberfläche festgestellt. Begleitend wurden Senkungsprognosen und Schutzschichtbewertungen angepasst sowie notwendige gesteinsmechanische Untersuchungen im Labor und in-situ-Messungen durchgeführt. Im Ergebnis von umfangreichen Untersuchungen wurde deutlich, dass die Aussagen aus 2D-Modellen aufgrund der dabei zu treffenden, modellbedingten Vereinfachungen (besonders Pfeilergeometrie und Baufeldverhalten) bezüglich der Langzeitsicherheit und der Barrierenintegrität sinnvollerweise durch eine dreidimensionale Modellierung des Baufeldes ergänzt werden sollten.

Zur Untersuchung des Systemverhaltens werden zwei 3D-Scheibenmodelle verwendet, die sich an zwei zueinander orthogonalen Schnitten durch das Zentrum des Baufeldes orientieren. Die Schnitte werden nachfolgend stets als „Schnitt 1“ und „Schnitt 2“ be-

zeichnet. Aufgrund der zu erwartenden hohen Verformungen wurde die in dieser Arbeit vorgestellte und entwickelte Modellierungstechnik angewendet, die es erlaubt, die Pfeiler als Diskontinuum zu modellieren und damit die Struktur des Salzgesteins sowie dessen Bruchprozesse auch bei sehr hohen Verformungen physikalisch plausibel nachzubilden. Die umfangreichen Validierungen anhand von Laborversuchen typischer Steinsalze (Kapitel 7) unter verschiedensten Randbedingungen und Belastungsformen an Einzelpfeilern aus Steinsalz bilden dabei die Grundlage dieser Untersuchungen.

8.1.2 Scheibenmodell Schnitt 1

Modellaufbau

Mit der beschriebenen Methodik wurde ein 3D-Modell für den ausgewählten Schnitt 1 erstellt, mit dem die numerischen Berechnungen ausgeführt wurden. Abb. 8.1 zeigt die prinzipielle Stratigraphie im betrachteten Schnitt sowie die Lage des Abbaus.

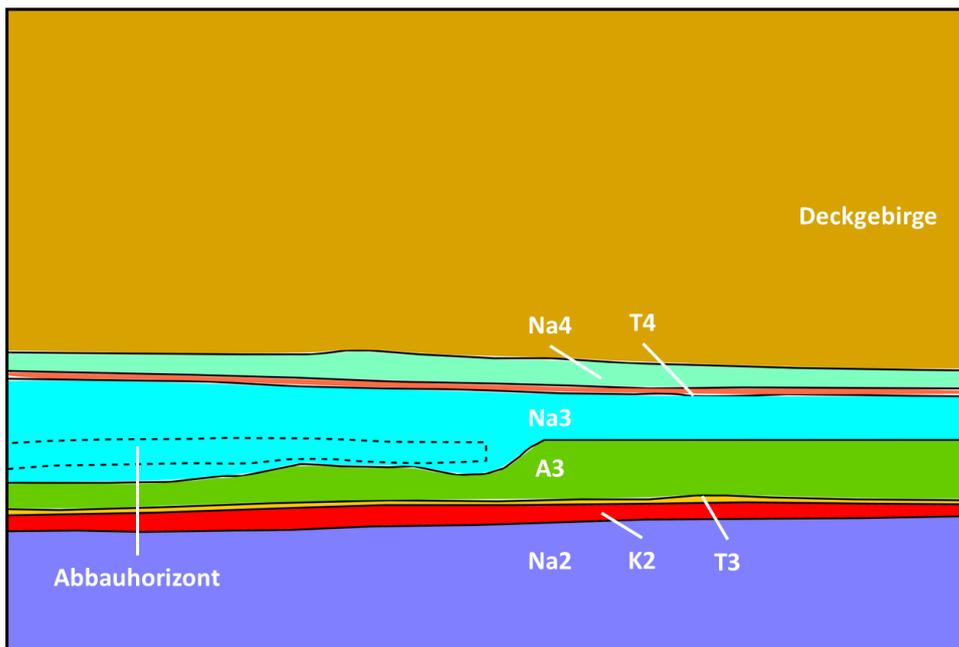


Abb. 8.1: Stratigraphie und Lage der Abbaue im WE-Schnitt.

Das numerische Scheibenmodell enthält eine Pfeilerreihe sowie die begleitenden Abbaue (Abb. 8.1). Das gesamte numerische Modell hat eine Abmessung ($B \times H \times T$) von ca. $1100 \times 780 \times 58 \text{ m}^3$ und enthält ca. 500000 Zonen und 300000 Block-Kontakte. Der linke Modellrand wird in x-Richtung fixiert und stellt damit eine Symmetrieebene dar.

Das Modell erstreckt sich bis zur Tagesoberfläche, weshalb keine zusätzliche Auflast auf der Modelloberkante notwendig ist, sondern sich das Spannungsfeld aus den Dichten der geologischen Schichten ergibt. Der untere Modellrand wird in z-Richtung festgehalten. Die Ermittlung des wirkenden lithostatischen Teufendruckes erfolgte entsprechend des Aufbaus des Deckgebirges und des Zechsteins, mit einem Teufendruckgradienten von:

$$D_G = \rho \cdot g = 0,0245 \text{ MPa/m} \quad (8.1)$$

wobei sich für den Zechstein im Bereich des Baufeldes näherungsweise ein isotroper Primärspannungszustand mit einem Seitendruckbeiwert (Verhältnis von Horizontalspannung zu Vertikalspannung) von $\lambda = 1$ ergibt. In Gebirgsschichten mit ausgeprägtem Kriech- und Relaxationsverhalten – wie Salzgesteinen – bestätigen Messergebnisse die Ausbildung eines isotropen Spannungszustandes mit allseitig gleichem Druck, der dem lithostatischen Überlagerungsdruck entspricht [15, 82]. Dementsprechend wurde der Seitendruckbeiwert 1 im Zechstein angesetzt. Aus Spannungssondierungen im postsalinaren Deckgebirge sind Seitendruckbeiwerte im Bereich $\lambda = 0,6$ bis $0,8$ abzuleiten. Der Wert von $\lambda = 0,6$, der in den Berechnungen angesetzt wurde, kann ohne Berücksichtigung eines tektonischen Anteils als unterer Grenzwert für den Seitendruckbeiwert des Deckgebirges in flacher Lagerung angesehen werden. Weiterhin wurde die Wirkung eines hydrostatischen Porenwasserdruckes auf die Effektivspannung von der Tagesoberfläche bis zur Oberkante des Zechsteins angenommen. Ausgehend von diesem Initialspannungszustand wird dann zunächst ein mechanischer Grundspannungszustand unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Dichteverteilungen durch eine längere Ausgleichsrechnung ohne Streckenauffahrungen hergestellt.

Neben den Abbaukammern sind im Baufeld weitere Strecken vorhanden, die während der Vorrichtung und für Bewetterung und Förderung aufgefahren wurden. Diese verlaufen in sog. Zwischenpfeilern und sind von ihren Abmessungen deutlich kleiner als die Abbaukammern. Eine detaillierte Modellierung in 3D würde den Aufwand für die Modellerstellung erheblich vergrößern und zu längeren Rechenzeiten führen. Da die Strecken für das Senkungsverhalten von untergeordneter Bedeutung sind wurden die Querschnitte in diesem Zwischenpfeiler zu einem äquivalenten Ersatzquerschnitt zusammengefasst (Abbildung 8.2).

Alle Pfeiler des Abbaufeldes wurden gemäß der diskontinuumsmechanischen Berechnungsmethode durch eine Voronoi-Triangulation durch kleinere, unregelmäßig geformte

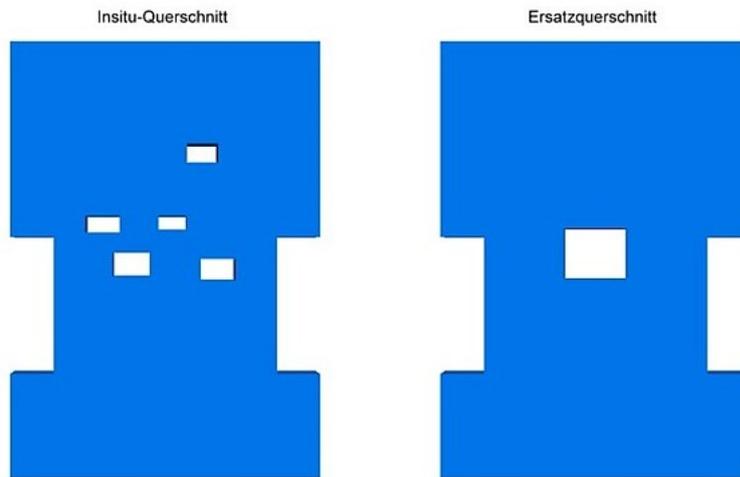


Abb. 8.2: Ersatzquerschnitt für Zwischenpfeiler.

Polyeder dargestellt (Abbildung 8.3) und gemäß den in Kap. 7 abgeleiteten und in Anlage B angegebenen Parametern belegt (Tabelle B.1 & B.2).

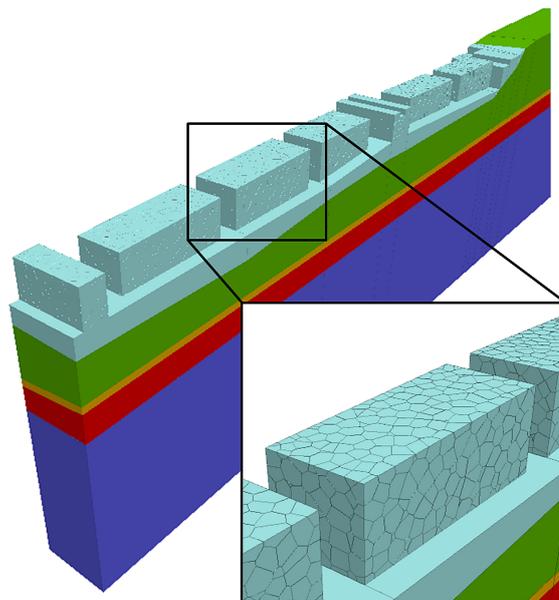


Abb. 8.3: Modellierter Abbaustruktur (Hangendes ausgeblendet) und diskontinuumsmechanische Zerlegung der Abbaupfeiler.

Der im Deckgebirge vorwiegend anstehende Buntsandstein ist nicht kompakt ausgebildet und intakt, sondern von einer Schar steil bis seiger einfallender Störungs- und Schwächeflächen durchzogen. Somit sind Bewegungen im Trennflächengefüge des Deckgebirges möglich. Der Buntsandstein wurde daher in vereinfachter Art und Weise als geklüfteter Gesteinskörper modelliert, indem er mit vertikalen Rissstrukturen durchzo-

gen wurde, die sich ebenfalls unter Zug- und Scherbeanspruchung öffnen können. Für die Schichtflächenparameter innerhalb des Bundsandsteines wurden hierfür die Ergebnisse von triaxialen Scherversuchen an Bundsandsteintrennflächen verwendet [83], um das Schichtflächenmodell zu parametrisieren (Anhang B.3).

Nachbildung des Abbauverlaufes

Die Zeitentwicklung des Senkungsverhaltens an der Tagesoberfläche wird maßgeblich vom tatsächlichen räumlichen und zeitlichen Verlauf der Abbauarbeiten bestimmt. Aus diesem Grund muss dieser Ablauf auch im geomechanischen Modell so nachvollzogen werden, dass zu einem bestimmten Zeitpunkt der jeweils in-situ vorliegende Lastfaktor möglichst gut abgebildet wird. Die Schwierigkeit besteht jedoch darin, dass sich der reale Abbauverlauf aufgrund seiner räumlichen Verteilung i. A. nicht direkt auf das Streifenmodell übertragen lässt. Aus diesem Grund wurde eine Umrechnung vorgenommen, um die zeitabhängige Belastung bezogen auf den modellierten Streifen möglichst gut nachzubilden. Hierfür wurde jeder Abbau zu seinem ungefähren Abbauzeitpunkt bezüglich seiner Entfernung zum Senkungszentrum und damit seinem relativen Anteil am Senkungsvorgang bewertet.

Dazu wurde die Auffahrungsgeschichte des Bergwerkes herangezogen. Für jeden Auffahrungsschritt eines Volumens V_i zum Zeitpunkt t_i und im Abstand r_i zum späteren Senkungszentrum wurde in Anlehnung an die markscheiderische Senkungsformel von Schober & Sroka [84] ein Wirkfaktor

$$R_i(V_i, t_i, r_i) = H(t - t_i) \cdot V_i \cdot \exp \left[-\frac{r_i^2}{r_{ref}^2} \right] \quad (8.2)$$

definiert, wobei H die Heaviside-Sprungfunktion und r_{ref} ein vorgegebener Normierungsabstand ($r_{ref} \approx 500$ m, d.h. etwa der Radius des Baufeldes) ist. Somit lässt sich zu jedem Zeitpunkt ein Auffahrungsgrad bezüglich des Senkungszentrums angeben durch:

$$R(t) = \sum_i R_i(V_i, t, r_i) \quad (8.3)$$

bzw. normiert auf den Endzustand der vollständigen Auffahrung aller Strecken:

$$R^*(t) = \frac{R(t)}{R(t_{end})} = \frac{\sum_i R_i(V_i, t, r_i)}{\sum_i R_i(V_i, t \rightarrow t_{end}, r_i)} \quad (8.4)$$

Ausgehend vom Anfangszustand bis zur vollständigen Auffahrung der Abbaue lässt sich so ein ungefährender Wert für den auf 100% normierten Belastungsverlauf im Senkungszentrum angeben (Abbildung 8.4). Im dreidimensionalen Streifenmodell wurde dann der zeitliche Ablauf von Hangendauffahrung und Strossen so angepasst, dass eben jener Belastungsverlauf auch im geomechanischen Modell näherungsweise abgebildet wird. Auf diese Weise konnte die komplizierte räumliche und zeitliche Einwirkung des realen Abbauverlaufes auf nachvollziehbare Weise für das Scheibenmodell umgerechnet werden.

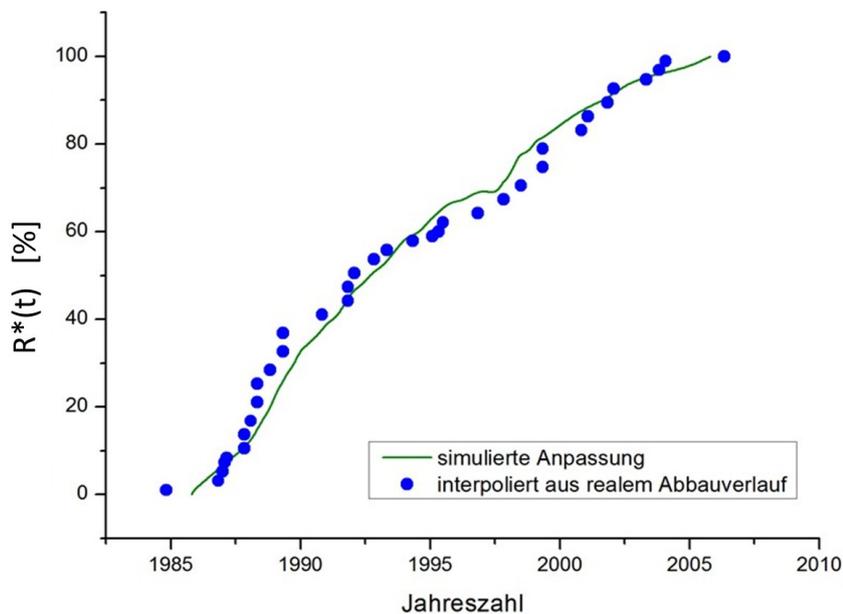


Abb. 8.4: Umrechnung der realen Lastentwicklung auf das Streifenmodell.

Berechnungsergebnisse

Die Berechnung des Abbauverlaufes und des darauffolgenden langzeitigen Systemverhalten wurde über einen Gesamtzeitraum von etwa 1000 Jahren durchgeführt. Mittels der diskontinuumsmechanischen Modellierung konnte das Senkungsverhalten - insbesondere bezüglich der beschleunigten Senkungsentwicklung – mit guter Genauigkeit reproduziert werden.

Die Oberflächensenkungen erreichen eine maximale (wieder prozentual bezogene) Rate von ca. 3,3 %/a (Abb. 8.5), was den beobachteten maximalen Senkungsraten entspricht. In der darauffolgenden Zeit zeigen die Senkungen einen degressiven Trend, durch den sich die Senkungsrates innerhalb von 100 Jahren auf ca. 0,12 %/a bei einer relativen Gesamtsenkung von 77% reduziert. Dies wird durch einen Selbstversatzprozess unterstützt,

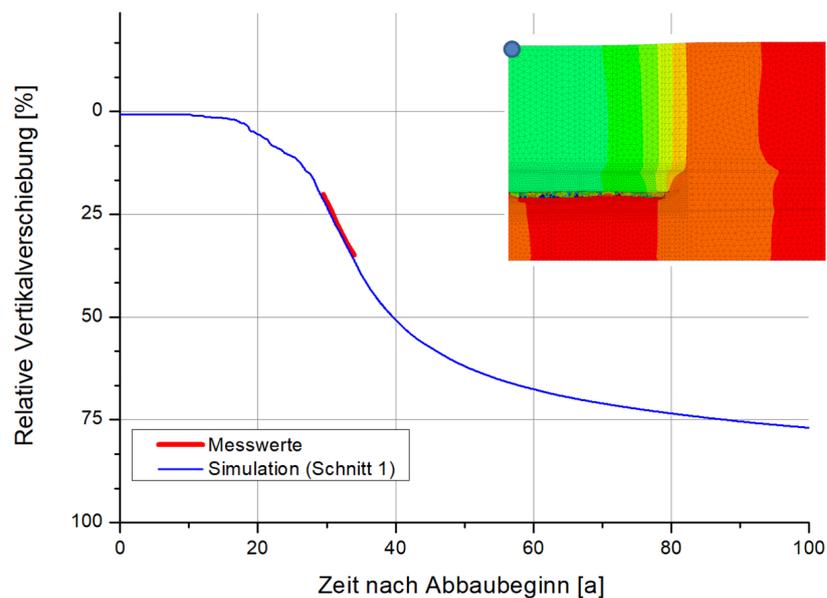


Abb. 8.5: Senkungsverlauf an der Tagesoberfläche (Senkungszentrum) über 100 Jahre.

der die Hohlräume mit den Abschaltungen der entfestigten Pfeilerbereiche auffüllt und somit die verbleibende Pfeilerstruktur stabilisiert. Ein derartiges Verhalten kann dabei nur durch die diskontinuumsmechanische Berechnungsmethode abgebildet werden, die das Abschalen und Herausbrechen von Pfeilergestein explizit modellieren kann. Bis zum Ende der Simulation etwa 1000 Jahre nach Abbaubeginn verfüllen sich bei weiter rückläufiger Senkungsrate die restlichen Hohlräume durch die kriechbedingte Deformation des verbrochenen Materials (Abb. 8.7 & Anlage B.4). Während sich der Bereich über den Abbaukammern relativ gleichmäßig absenkt, entsteht ein scharfer Übergang an der Abbaukante, der mit entsprechenden mechanischen Beanspruchungen in diesem Bereich einhergeht. Die darstellende Auswertung des Senkungsprofils an der Modelloberkante verdeutlicht dies (Abb. 8.6) und steht in guter Übereinstimmung mit übertägigen Messungen. Die Zerrbeanspruchung führt im Modell an der Tagesoberfläche zur Entstehung von Rissstrukturen im Buntsandstein (Anlage B.5).

8.1.3 Scheibenmodell Schnitt 2

Modellaufbau

Die Lage der Schnittspur des zweiten Scheibenmodells liegt orthogonal zu Schnitt 1. Die wesentlichen Bearbeitungsschritte bei der Erstellung sind in Analogie zur Erstellung des

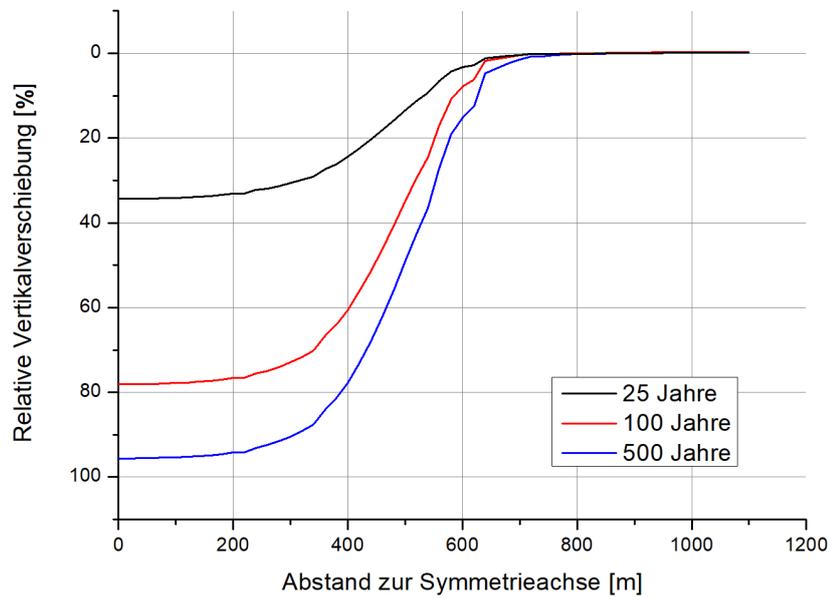


Abb. 8.6: Modellierte Senkungsprofile im Scheibenmodell 1 zu verschiedenen Zeitpunkten nach Beginn des Abbaus.

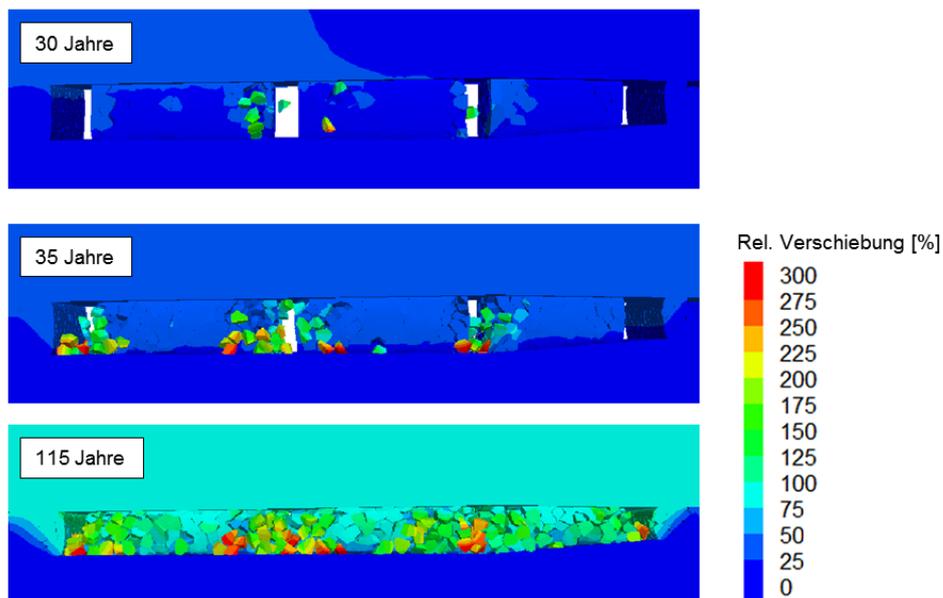


Abb. 8.7: Kriechdeformation und Konturabschalungen der Pfeiler, Entwicklung einer Selbstversatzwirkung.

Scheibenmodells für Schnitt 1 durchgeführt worden. Abbildung 8.8 zeigt schematisch die Modellstruktur des großräumigen Modells. Ein wichtiger Grund für die zusätzliche Betrachtung eines zweiten Schnittes durch das Baufeld liegt darin, dass das Flöz entlang dieser Achse leicht einfallend liegt ($\approx 8^\circ$) und somit Abbaue in verschiedenen Teufenbereichen vorliegen, während im Schnitt 1 ein weitestgehend konstantes Teufenniveau herrscht. Das Gesamtmodell hat eine Länge von ca. 2600 m und eine Höhe von 920 m. Im Vergleich

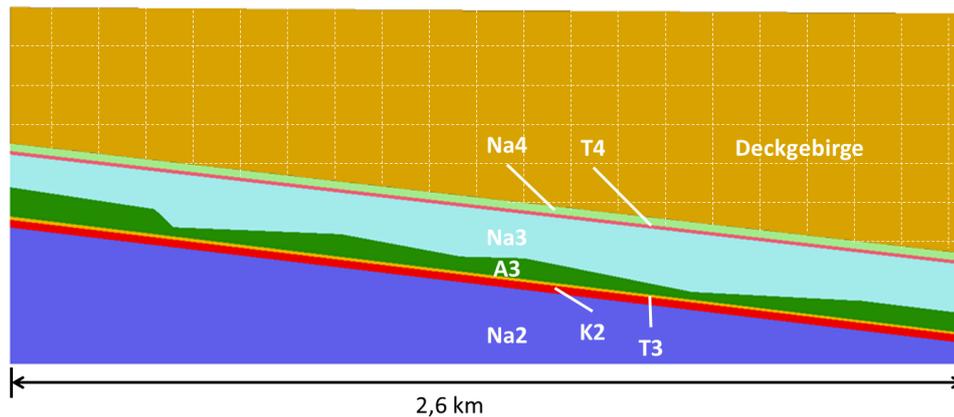


Abb. 8.8: Ansicht des Modells für den Schnitt 2 mit angedeuteter Zerlegung des Buntsandsteins.

zum Schnitt 1 ist das Modell also deutlich größer und enthält insgesamt 28 Pfeiler, von denen 24 als diskontinuumsmechanische Voronoi-Strukturen modelliert wurden. Bei den verbleibenden 4 Pfeilern handelt es sich um Querpfeiler, die i.A. von weiteren Förder- und Wetterstrecken durchzogen sind (Abb. 8.9). Da dies die diskontinuumsmechanische Erstellung stark erschwert und darüber hinaus ohnehin ein stark erhöhter Berechnungsaufwand zu erwarten war, wurden diese Zwischenpfeiler kontinuumsmechanisch modelliert. Das gesamte Scheibenmodell des Schnittes 2 beinhaltet damit ca. 1,5 Millionen Kontakte und 2,4 Millionen Zonen in 14500 Blöcken. Die Struktur des Buntsandsteins im Deckgebirge wird durch vertikale und horizontale Schichtflächen in regelmäßigen Abständen entsprechend eines orthogonalen Kluftsystems dargestellt und erlaubt somit analog zum Schnittmodell 1 die Beobachtung von Kluftöffnungen durch Zug- oder Scherbeanspruchungen.

Nachbildung des Abbauverlaufes

Für den Schnitt 2 lässt sich der reale Abbauverlauf im Vergleich zum Schnitt 1 ohne Umrechnung auf schnittspezifische Belastungswerte durchführen, da die Abbau vornehmlich

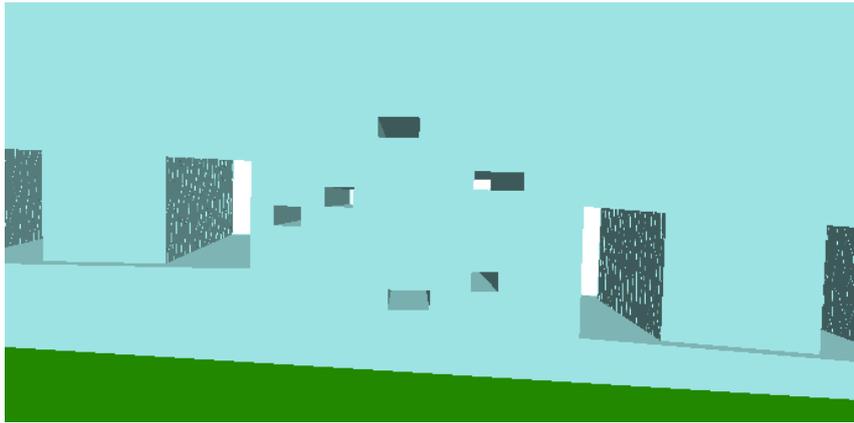


Abb. 8.9: Von Förder- und Wetterstrecken durchzogener Zwischenpfeiler.

senkrecht zum Modell aufgefahren wurden und damit in der diskontinuumsmechanischen Berechnung leicht zu den entsprechenden Zeitpunkten entfernt werden können.

Berechnungsergebnisse

Aufgrund des immensen Mehraufwandes wurden die Berechnung des Abbauverlaufes und des darauffolgenden langzeitigen Systemverhalten zunächst über einen verringerten Gesamtzeitraum von etwa 100 Jahren durchgeführt. Auch für den Schnitt 2 konnte mittels der diskontinuumsmechanischen Modellierung das Senkungsverhalten – analog zum Schnitt 1 – mit guter Genauigkeit reproduziert werden (Abbildung 8.10).

In diesem Modell erreichen die Oberflächensenkungen eine maximale Rate von ca. 3,1 %/a, was ebenfalls nahe an den beobachteten maximalen Senkungsraten liegt. In der darauffolgenden Zeit zeigen die Senkungen wiederum einen degressiven Trend, der zunächst sogar minimal stärker ausgeprägt ist, als dies im Scheibenmodell für Schnitt 1 der Fall war. Die Abweichung ist jedoch gering und die grundlegenden Mechanismen bleiben gleich.

8.1.4 Dynamische Berechnungen

Zusätzlich zum quasi-statischen Langzeitverhalten ist auch die Systemstabilität unter dynamischer Anregung zu untersuchen. Während für quasi-statische Modellierungen in den Rechencodes interne Dämpfungsglieder und Massenskalierungen für eine schnelle Konvergenz unter Maximierung des mechanischen Zeitschritts eingesetzt werden, müssen diese im dynamischen Berechnungsmodus angepasst bzw. ausgeschaltet werden, damit

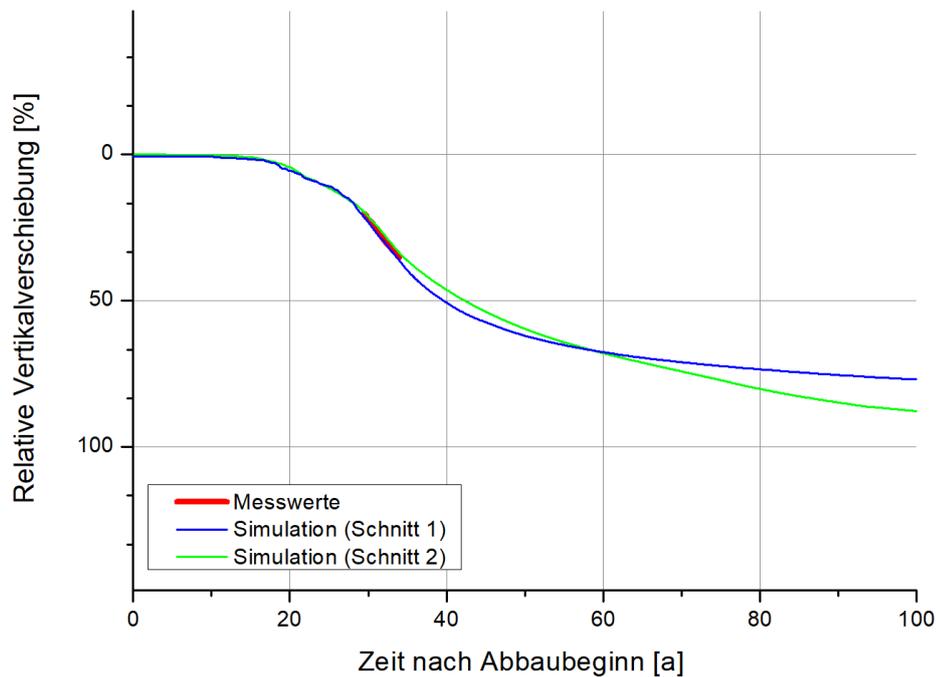


Abb. 8.10: Modellierter und gemessener Senkungsverlauf an der Tagesoberfläche im Senkungszentrum für beide Modellschnitte.

z.B. Schockwellen nach spontanem Pfeilerversagen nicht unrealistisch stark weggedämpft werden. Dies führt jedoch dazu, dass der mechanische Zeitschrittalgorithmus mit extrem kleinen Zeitschritten arbeiten muss, um die Wellenausbreitung korrekt abzubilden, weshalb dynamische Simulationen typischerweise nur einen Zeitraum von wenigen Sekunden abdecken können [13].

Anhand des Scheibenmodells für Schnitt 1 soll die Systemstabilität unter dynamischer Anregung zum Zeitpunkt der maximalen Senkungsraten modelliert werden. Hierfür wird die Systemreaktion auf den äußerst unwahrscheinlichen Extremfall eines spontanen und vollständigen Versagens eines zentrumsnahen Pfeilers untersucht. Zusätzlich werden auch am größeren und damit rechenintensiveren Scheibenmodell für Schnitt 2 zwei dynamische Anregungsfälle betrachtet.

Dynamische Anregung im Scheibenmodell für Schnitt 1

Im Rahmen der geomechanischen Untersuchung und zur Erweiterung des Verständnisses über das Systemverhalten wurde der Schnitt 1 einem Extremfall ausgesetzt, in dem ein zentrumsnaher Abbaupfeiler durch das manuelle Herabsetzen der Pfeilerfestigkeiten plötzlich vollständig versagt. Durch die Symmetrieebene am linken Modellrand bedeutet dies für

das Gesamtsystem also automatisch die schlagartige und gleichzeitige Entfestigung von zwei zentrumsnahen Pfeilern (Vgl. Abb. 8.12). Durch die Simulation als Scheibenmodell wird darüber hinaus auch die Wirkung in lateraler Richtung überschätzt. Es handelt sich dabei also um einen immens unwahrscheinlichen Extremfall, der auch nicht das typische Entfestigungsverhalten von Steinsalz-Langpfeilern mit den im Baufeld aufgefahrenen Abbauparametern widerspiegelt, sondern lediglich als äußerst konservative Anregungsbegrenze das diskontinuumsmechanische Modell in dieser Prinzipstudie einer sehr starken Belastung unterziehen soll.

Um Reflektionen der zu erwartenden Wellenausbreitung an der rechten Modellkante zu vermeiden, wurde dieser Randbereich nicht länger in x -Richtung fixiert, sondern als sogenannte „viskose Grenzfläche“ modelliert. Diese Einstellung ermöglicht die Dissipation von Wellenenergie an der Modellgrenze, ganz so als ob sich das Modell dort weiter in x -Richtung erstrecken würde. Da es sich bei der dynamischen Anregung um einen Kurzzeitprozess mit hohen Verformungsgeschwindigkeiten handelt, wird für die Simulationen dementsprechend nun die laborativ ermittelte Kurzzeitfestigkeit angesetzt (anstelle der reduzierten Langzeitfestigkeit für langsame in-situ Verformungsgeschwindigkeiten bei quasi-statischen Deformationen).

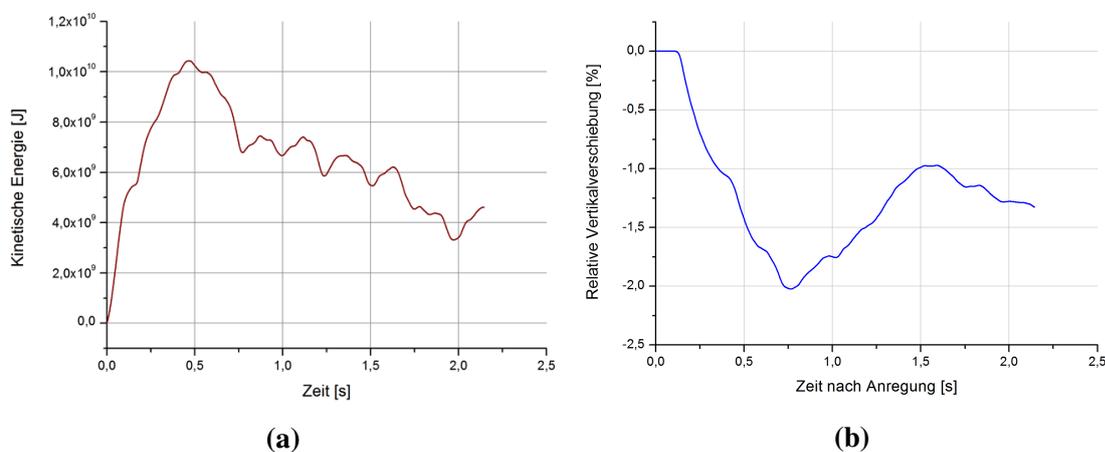


Abb. 8.11: Simulierte relative Vertikalverschiebung im Senkungszentrum und freigesetzte kinetische Energie nach manuell induziertem Pfeilerversagen im Schnitt 1.

Infolge des manuell induzierten, spontanen Tragfähigkeitsverlustes des angeregten Abbaupfeilers kommt es zu einer unmittelbaren elastischen Reaktion und der Ausbreitung einer Druckwelle in Richtung Tagesoberfläche. Die freigesetzte kinetische Energie E im

Modell erreicht im Maximum ca. 10,5 GJ (bzw. 21,0 GJ unter Berücksichtigung der Symmetrieebene am linken Modellrand), was sich anhand der empirischen Relation [13]:

$$M_L = \frac{1}{1,64} (\log(E) - 4,8) \quad (8.5)$$

in eine lokale Ereignismagnitude von etwa 3,3 umrechnen lässt (Abb. 8.11a). An der Tagesoberfläche kommt es dementsprechend zu einer zusätzlichen relativen Absenkung. Diese beträgt (aus Gründen des Datenschutzes erneut als relative Größe zur errechneten Maximalsenkung) ca. 2 % (Abb. 8.11b). Die vom angeregten Pfeiler nicht länger getragene Last wird im Laufe des dynamischen Prozesses auf die übrigen Pfeiler umverteilt. Hier war nun von besonderem Interesse, ob die benachbarten Pfeiler diese zusätzliche Last aufnehmen und tragen, oder ob ein kettenreaktionsartiger Pfeilerbruchvorgang einsetzt (Abbildung 8.12).

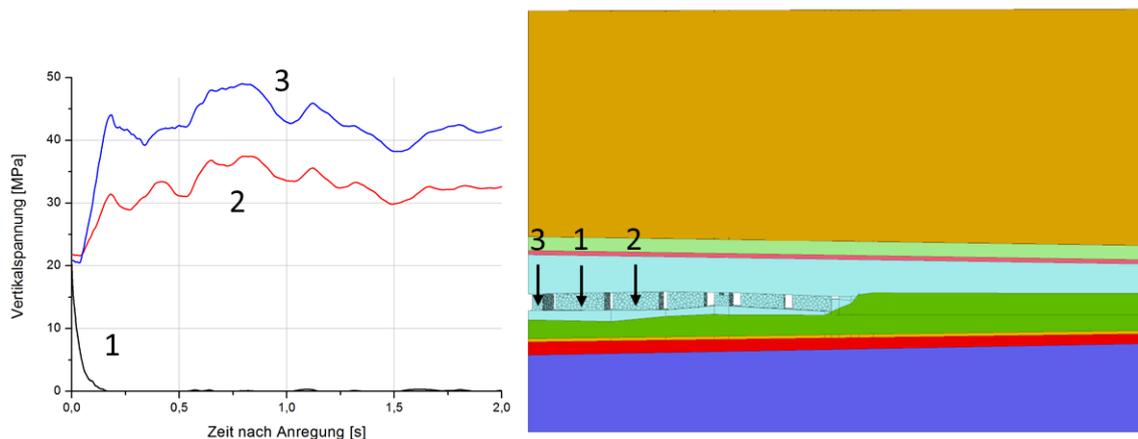


Abb. 8.12: Umverteilung der Last infolge des spontanen Tragfähigkeitsverlustes eines Einzelpfeilers.

In den Resultaten der diskontinuumsmechanischen Berechnungen nehmen die Nachbarpfeiler die Zusatzlast auf, ohne selbst in einen Entfestigungsprozess zu geraten. Das modellierte System ist also unter den verwendeten Stoffmodellen und Parametern auch in diesem stark konservativen Berechnungsfall stabil gegenüber der Anregung.

Dynamische Anregung im Scheibenmodell für Schnitt 2

Im Schnitt 2 wurden in ähnlicher Vorgehensweise zum vorangegangenen Abschnitt ebenfalls dynamische Berechnungen durchgeführt. Hierbei sollte nun neben der vergleichenden Berechnung des unrealistischen Extremfalles „vollständiges Pfeilerversagen“ auch eine

etwas moderatere Anregung in Form eines großflächigen, einseitigen Konturbruches simuliert werden. Als Anregungspfeiler wurde in der Abbaugeometrie des Schnittmodells

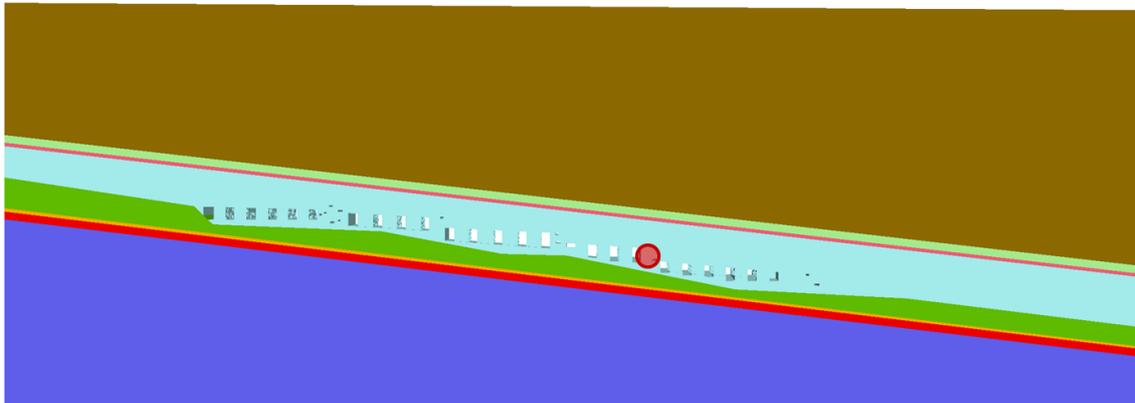


Abb. 8.13: Auswahl des Anregungspfeilers im Scheibenmodell für Schnitt 2.

aus Konservativitätsgründen der gekennzeichnete Barrierepfeiler aufgrund seiner großen Mächtigkeit und hohen Teufenlage gewählt (Abb. 8.13).

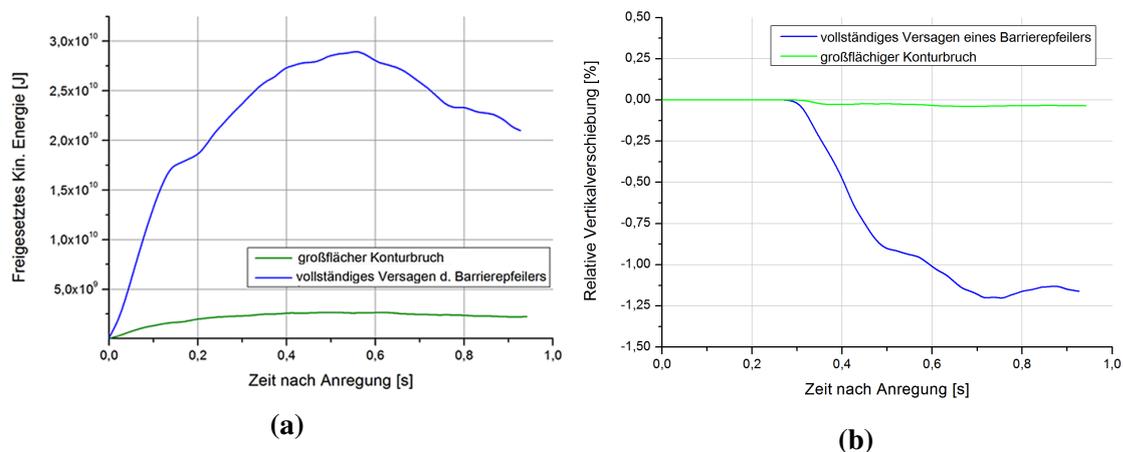


Abb. 8.14: Simulierte Vertikalverschiebung im Senkungszentrum und freigesetzte kinetische Energie nach manuell induziertem Pfeilerversagen im Schnitt 2.

Infolge eines manuell induzierten, schlagartigen Tragfähigkeitsverlustes des gesamten Barrierepfeilers kommt es ähnlich wie im Schnitt 1 zur Entwicklung einer Druckwelle und entsprechender Absackung an der Tagesoberfläche sowie zu einer Lastumverteilung im Abbauhorizont. Die maximal freigesetzte kinetische Energie im Modell beträgt ca. 28 GJ und damit berechnet sich die Ereignismagnitudo zu $M = 3,3$ (Abbildung 8.14a). Die zusätzliche relative Absenkung an der Tagesoberfläche erreicht ca. 1,2 % (Abb. 8.14b).

Auch im Scheibenmodell für Schnitt 2 bleibt das Gesamtsystem unter dieser Anregung stabil. Lediglich kleinere zusätzliche Abschalungen an vereinzelt Pfeilern werden durch die dynamische Lastumverteilung ausgelöst.

Im Vergleich zum Pfeilerversagen ist die Reaktion auf die großflächige Konturentfestigung weitaus weniger stark. Hierbei wurde auf einer Pfeilerseite die Festigkeit bis in ca 30% der Pfeilerbreite hinein drastisch verringert. Dies führt ebenfalls zum kurzzeitigen dynamischen Nachgeben des Pfeilers, wobei dieser jedoch nun nicht vollständig entfestigt, sondern die Last weiterhin trägt. Somit ist es lediglich der kurze Zeitraum der Spannungsumverteilung der zur Ausbildung einer schwächeren Druckwelle führt, deren Geschwindigkeitsmagnituden etwa eine Größenordnung geringer ist, als im Extremfall des Pfeilerversagens. Dementsprechend wird in dieser Modellberechnung eine deutlich geringere Absenkung an der Modelloberkante von ca. 0,05 % ausgewiesen. Die Ereignismagnitude ergibt sich aus der freigesetzten kinetischen Energie von etwa 2,5 GJ zu $M=2,7$ (Vgl. Abbildungen 8.14a und 8.14b).

8.1.5 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Studie wurde der diskontinuumsmechanische Simulationsansatz zur Untersuchung von Pfeilertragverhalten und Senkungsentwicklung in einem Steinsalz-Abbaufeld angewendet. Der Ansatz wurde vorangehend anhand von umfangreichen Nachrechnungen zugehöriger Laborversuche validiert und für die großräumigen Simulationen parametrisiert.

Für die geomechanischen Untersuchungen wurden zwei 3D-Modelle erstellt, die jeweils einen Streifen in zueinander orthogonalen Schnittspuren durch das Abbaufeld abbilden. Im Rahmen der Simulationen wurde das Verhalten des Scheibenmodells für Schnitt 1 über ca. 1000 Jahre simuliert, während im deutlich größeren Schnitt 2 bis etwa 100 Jahre gerechnet wurde. Das Ziel der Untersuchungen war es, ein Instrumentarium zu entwickeln, anhand dessen das Verhalten von Steinsalzpfeilern innerhalb ihrer Abbaugeometrie bis in hohe Verformungsbereiche und unter verschiedensten Belastungsszenarien zu untersuchen und zu verstehen.

In beiden Modellen konnte das Senkungsgeschehen – insbesondere die Beschleunigungsphase – mit maximalen Senkungsgeschwindigkeiten von 3,3 %/a mit guter Genauigkeit reproduziert werden. Für die zukünftige Entwicklung prognostizieren beide

Berechnungen einen degressiven Trend der Senkungsgeschwindigkeiten, die innerhalb von 100 Jahren bis unter 0,1 %/a fallen. Im Langzeitprozess stabilisiert sich das Pfeilersystem durch die Selbstversatzwirkung der eigenen Abschalungen und verschließt die geschaffenen Hohlräume selbstständig. Nach 1000 Jahren hat sich im Modell eine annähernd konstante Endsenkung bei einer sehr geringen Restsenkungsrate $< 0,01$ %/a eingestellt. Trotz ihrer unterschiedlichen Geometrien und Abmessungen zeigen beide 3D-Scheibenmodelle gute Übereinstimmungen bezüglich ihrer Prognosen und stützen damit zusammen mit den erfolgreichen Nachrechnungen der Laborversuche die Belastbarkeit der aus den Simulationen abgeleiteten Aussagen.

Im dynamischen Anregungsfall blieben beiden Modellvarianten auch unter hoher Belastung durch die konservative Annahme extrem unwahrscheinlicher Versagensszenarien stabil. Die obertägigen Auswirkungen korrelierten dabei entsprechend der Stärke der Anregung, wobei die zusätzliche Last jeweils von den verbleibenden Pfeilern aufgenommen wird.

8.2 Hydro-mechanische Kopplung am Beispiel der Kavernenspeicherung

In den zurückliegenden Jahrzehnten wurden Speicherkavernen vorwiegend in saisonalen Speicherzyklen betrieben, d.h. im Sommer wurde ein- und im Winter ausgespeist. Dementsprechend sind die geomechanischen Untersuchungen zur Bestimmung der charakteristischen Betriebsparameter (max. Speicherdrücke etc.) für Speicherkavernen in der Regel basierend auf diesem Druckverlaufsszenario abgeleitet. Aufgrund von neuen Entwicklungen auf dem internationalen Gasmarkt werden jedoch mittlerweile von Kavernenbetreibern immer häufiger Operationszyklen und Druckregimes mit häufigen und schnellen Druckveränderungen anvisiert. Diese Fahrweisen führen jedoch zum Auftreten zusätzlicher Effekte, die im Rahmen von moderaten saisonalen Speicherzyklen keine bzw. nur untergeordnete Relevanz haben und nun für die Bewertung der Kavernenintegrität und den modifizierten Betriebsparametern berücksichtigt werden müssen.

In nachfolgendem Anwendungsbeispiel soll der diskontinuumsmechanische Berechnungsansatz zur Bewertung und Optimierung der Betriebsparameter von Gasspeicherkavernen im hochfrequenten Betrieb angewandt werden. Für die hier betrachteten Kavernen erfolgte bereits auf kontinuumsmechanischem Wege eine Begutachtung, in der die maximal und minimal zulässigen Betriebsdrücke und maximalen Verweilzeiten bei niedrigen Drücken festgelegt worden sind. Die Kavernen werden gegenwärtig vornehmlich im saisonalen Speicherbetrieb gefahren für den diese entsprechenden Begutachtungen vorliegen. Zukünftig sind auch höher frequente Speicherfahrweisen angedacht, wobei in die Betrachtungen zur Optimierung und Vereinheitlichung des Speicherregimes folgende Problemstellungen einzubeziehen sind:

- maximale Ausspeiseraten
- Standzeiten bei niedrigen Speicherdrücken
- minimale und maximale Speicherdrücke

Die bisherige Kavernendimensionierung basiert auf empirischen Ansätzen, in Jahrzehnten gesammelter Erfahrungen und numerischen gebirgsmechanischen Berechnungen. Aktuell wird international im Rahmen des SMRI diskutiert [85], ob und in welchem Ausmaß dilatante Zonen zulässig sind und Bereiche in denen die Zugfestigkeit bzw. effektive Zugfestigkeit verletzt wird. Die gestellte Aufgabenstellung erfordert eine vertiefte

Betrachtung der Schädigungsentwicklung und Konturstabilität der Kavernen über den Betriebszeitraum unter Berücksichtigung von:

- Zugspannungen und Frac-Gefahr
- Konturschädigungen durch mechanische Entfestigung (Dilatanz)
- Gasdruckbelastung im Salzgestein (druckgetriebene Perkolation)
- thermomechanischen Einflüssen auf die Konturstabilität
- realer Kavernengeometrie und -größe
- Beanspruchung im Rohrschuhbereich

Zur Lösung der Aufgabenstellung sind über bisherige Betrachtungen hinaus, gekoppelte thermo-hydro-mechanische Berechnungen erforderlich, mit denen die Wechselwirkung der Prozesse in den geomechanischen Modellen erfasst und abgebildet werden kann. Für die Berechnungen wird der in dieser Arbeit vorgestellte diskontinuumsmechanische Modellierungsansatz verwendet, um die Simulation von Frac-Vorgängen und die fluiddruckgetriebene Perkolation zu ermöglichen. Auf dieser Grundlage lassen sich die komplexen Wechselwirkungen zwischen Spannungen, Verformungen, Dilatanz, Entfestigung, Konturbruch und Fluiddruck simulieren.

8.2.1 Grundlegende gebirgsmechanische Vorgänge bei der Gasspeicherung in Salzkavernen

Die Aussolung von Kavernen in mächtigen Steinsalzformationen stellt grundsätzlich einen erheblichen Eingriff in den herrschenden thermomechanischen Zustand dar. Umso mehr trifft dies zu, wenn die Sole anschließend durch komprimiertes Gas verdrängt wird.

Durch die Auflösung des Steinsalzes durch eine gelenkte Einleitung von Süßwasser über die Kavernenbohrung wird ein Hohlraum geschaffen, der sich im Zuge des Solprozesses entwickelt und vergrößert. Der Kavernenhohlraum steht dabei unter einem permanenten Innendruck, der dem hydrostatischen Druck der Solesäule im Förderstrang bis zur Tagesoberfläche entspricht, aber dennoch erheblich kleiner ist als der initiale Gebirgsdruck. Der

Druckunterschied Δp zwischen dem initialen isotropen Gebirgsdruck in der Lagerstätte und dem Innendruck in der Kaverne mit Sole beträgt bezogen auf die betrachtete Teufe

$$\Delta p = (\gamma_{\text{Salz}} - \gamma_{\text{Sole}}) \cdot H \quad (8.6)$$

wobei H die Teufe und γ das spezifische Gewicht von Sole bzw. Steinsalz ist.

Bei der nachfolgenden Befüllung mit Gas ändert sich das mechanische Gleichgewicht. Zunächst muß der Gasdruck höher sein als der hydrostatische Druck der Sole im Kavernen-tiefsten, um diese verdrängen zu können. Am Kavernenkopf muss daher ein erheblicher Überdruck aufgebaut werden um die Kaverne erstmals mit Gas befüllen zu können. Der Druckunterschied zwischen dem initialem Gebirgsdruck und dem Gasdruck wird dann kleiner und kann ausgedrückt werden durch:

$$\Delta p(H) = (\gamma_{\text{Salz}} \cdot H) - p_{\text{Kopf}} - \int_0^H \gamma_{\text{Gas}}(p, T) dz \quad (8.7)$$

mit γ_{Gas} = spez. Gewicht von Gas (druck- und temperaturabhängig) und p_{Kopf} = Druck am Sondenkopf. Nach der Erstbefüllung mit Gas ist der Druck im Kavernen-tiefsten etwas höher als der ehemalige Soledruck, aber kleiner als der lithostatische Teufendruck. Im Bereich des Kavernendaches ist der Gasdruck dann allerdings deutlich höher als der ehemalige Soledruck, denn der Teufendruckgradient des Gases ist auch bei Kompression deutlich kleiner als der von Sole und Gebirge. Auch bei schwankendem Gasdruck wird im Kavernen-tiefsten der Gasdruck immer kleiner sein als der lithostatische Teufendruck. Die Konvergenz des Gebirges wird hier stetig in Richtung Kavernenmitte auftreten und die Kaverne wird insbesondere in diesem Bereich immer schmaler. Im Kavernendach liegt der Gasdruck maximal geringfügig unter dem ursprünglichen Gebirgsdruck. Eine Überschreitung muss hier grundsätzlich vermieden werden, um Zugspannungen und damit eine Frac-Gefahr zu verhindern.

Abb. 8.15 zeigt die grundlegende mechanische Reaktion der Tangential- und Radialspannungen während eines Druckanstieges bzw. -abfalls anhand eines horizontalen Schnittes. Während des Druckaufbaus verringert sich die tangentielle Einspannung, während die Radialspannung steigt. Ein Druckabfall hingegen induziert eine sinngemäß umgekehrte Reaktion. Diese einfache Betrachtung gilt jedoch streng genommen nur unter Vernachlässigung thermo-mechanischer Effekte, die gerade für hochfrequente Kavernenspeicherung zunehmend an Bedeutung gewinnen.

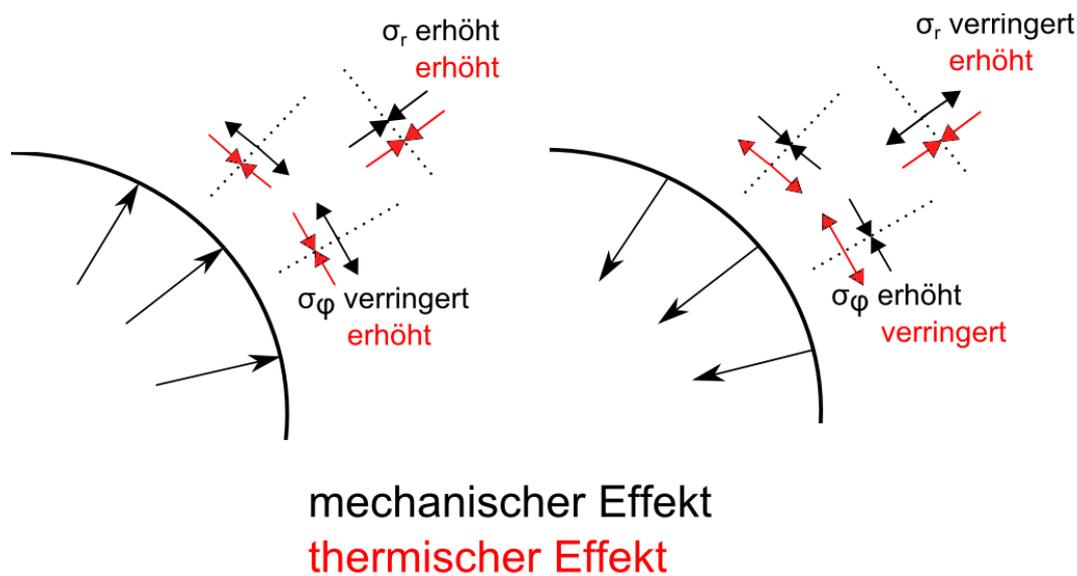


Abb. 8.15: Prinzipielles Verhalten von Tangential- und Normalspannungen an der Kavernekontur bei Druckanstieg (links) bzw. -abfall (rechts) im Horizontalschnitt. Rein mechanischer (schwarz) und thermo-mechanischer (rot) Einfluss.

Das Einleiten eines Gases in die Kaverne führt zu einer Erwärmung, denn das überwiegend adiabatisch komprimierte Gas wird mit hoher Temperatur in die Kaverne eingeleitet. Bei längeren Standzeiten mit hohem Druck bildet sich ein thermisches Gleichgewicht und die Gastemperatur wird sich der Gebirgstemperatur angleichen. Aufgrund der vergleichsweise kleinen Wärmekapazität und der hohen Beweglichkeit des Gases wird dies viel schneller erfolgen als in einer solebelassenen Kaverne. Bei der Ausspeisung des Gases erfolgt hingegen eine starke Abkühlung, die aber aufgrund der geringen Wärmekapazität des Gases nicht lange bestehen bleibt. Beim regelmäßigen Wechsel von Ein- und Ausspeisungen werden sich die Temperaturschwankungen nur auf die unmittelbare Kontur der Kaverne auswirken. Einige Meter hinter der Kontur wird sich eine mittlere Temperatur einstellen, die aber i.A. unter der ursprünglichen Gebirgstemperatur liegt.

Die Temperaturschwankungen führen aber auch zu mechanischen Spannungen. Eine Abkühlung führt zu Zugspannungen, eine Erwärmung zu Druckspannungen. Auch hier können Dilatanz und Schädigungen durch starke Temperaturgradienten induziert werden. Dabei wirkt der Temperatureffekt insbesondere auf die Tangentialspannungen bei Druckanstieg und -abfall jeweils gegenläufig zum rein mechanischen Einfluss: Während ein schneller Druckabfall die Tangentialspannung im Grunde erhöht, führt die damit einhergehende Abkühlung zum Zusammenziehen des Materials und damit eher zu einer Verringerung der

Einspannung. Welcher Effekt sich letztendlich durchsetzt bzw. wann der Temperatureffekt möglicherweise zu einer größeren Integritätsverletzung in die Kavernenkontur führt, hängt entscheidend von der Höhe der Änderungsraten von Druck und Temperatur ab.

Die Festigkeit und Verformbarkeit des Salzgebirges ist darüber hinaus abhängig von der Belastungsgeschwindigkeit. Bei schnellen Belastungen überwiegen elastische und plastische Verformungen. Hingegen wirkt bei langsamen Belastungen ein Spannungsabbau durch Kriechbewegungen dem Scherspannungsaufbau entgegen. Eine schnelle Ein- und Ausspeicherung von Gas mit großen Druckauf- und Abbauraten führt somit zu deutlich höheren Belastungen im Vergleich zu langsamen Druckänderungen. Eine wichtige Fragestellung ist die Perkolation von Gas in das Gebirge und wieder zurück in die Kaverne. Grundsätzlich bewirken dilatante Zonen, bedingt durch den vergrößerten Porenraum, eine höhere Durchlässigkeit für Gase und Flüssigkeiten. Weiterhin ist das Verhältnis des Gasdruckes zum Gebirgsdruck entscheidend. Wenn der Gasdruck den Gebirgsdruck erreicht und überschreitet steigt die Permeabilität sprunghaft an, es entstehen druckgetrieben Fließwege entlang der Korngrenzen, die vorhandene Poren verbinden. Das in das Gebirge perkolierte Gas ist bei größerem Volumen auch für die Betrachtung wichtig, denn es kann bei schneller Druckentlastung zu Zugspannungen im Gebirge führen und Schädigungen hervorrufen. In Gaskavernen wird im normalen Betriebsablauf allerdings immer vermieden, den Gasdruck über den initialen Gebirgsdruck bzw. die minimale Hauptspannung im umgebenden Steinsalzgebirge zu erhöhen. Nur an der Kontur können sich Gasdruck und minimale Hauptspannung angleichen.

8.2.2 Modellaufbau

Nachfolgend betrachten wir die beschriebenen Effekte anhand eines Horizontalschnittes durch eine typische Kaverne in einer Teufenlage von ca. 1200 bis 1500 m mit einem mittleren Radius von 25 m. Die Referenzteufe des Schnittes wurde in konservativer Hinsicht am höchstmöglichen Punkt gewählt. Damit wird der ungünstigste Fall – d.h. ein hoher Durchmesser nahe der Kavernenfirste – abgedeckt. Die Teufenlage des Horizontalschnittes entspricht daher einem initialen Teufendruck von ca. 33 MPa. Insgesamt weist das Horizontalmodell eine Gesamtbreite und –höhe von je 400 m auf (Abb. 8.16).

Durch die Verwendung eines horizontalen Schnittes wird implizit ein in vertikaler Richtung unendlich ausgedehnter Hohlraum modelliert, wodurch zu erwarten ist, dass die model-

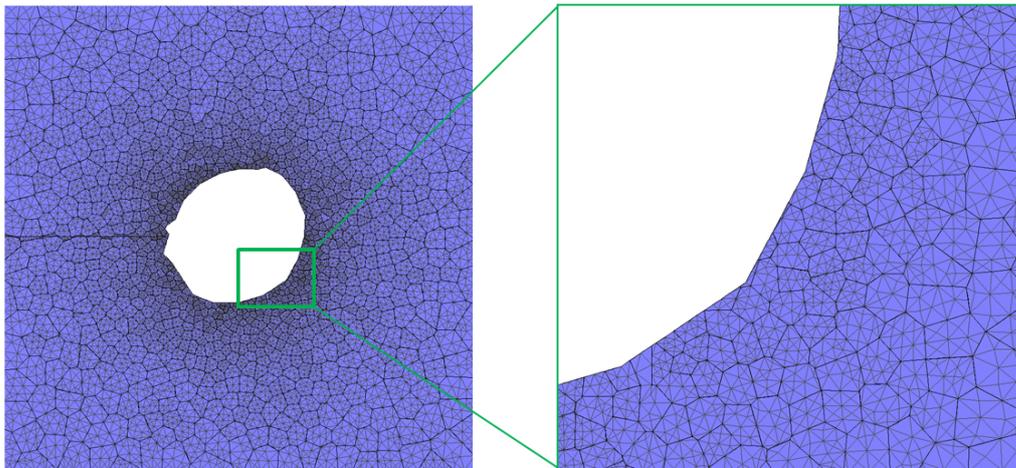


Abb. 8.16: Diskontinuumsmechanisches Horizontalschnittmodell der Kaverne (links) und Nahaufnahme der Blockstruktur und Vernetzung (rechts).

lierten Einspannungen im Horizontalschnitt konservativ etwas geringer sein werden, als in einer vollständigen dreidimensionalen Simulation. Der Ausgangsspannungszustand vor der Gasbefüllung wird durch die Nachbildung der Kavernensolung über 5 Jahre ausgehend von einem isotropen Initialzustand durch Entfernen des Kavernenhohlraums und schrittweise Verringerung einer Druckrandbedingung an der Kavernenkontur modelliert. Basierend auf dem hierdurch entstandenen Spannungsfeld wird die hydro-diskontinuumsmechanisch gekoppelte Berechnung für diverse Szenarien und Betriebszyklen fortgeführt, die nachfolgend vorgestellt werden.

8.2.3 Berechnungsvarianten und Betriebszyklen

Vor der expliziten Simulation der Betriebszyklen wurde das Kavernenverhalten – insbesondere die Abhängigkeit der Standzeit bei geringem Druck – durch mehrere Berechnungsvarianten eines einfachen Druckaufbaues ausgehend von verschiedenen Initialdrücken untersucht. Hierfür wurde die modellierte Kaverne nach Erstbefüllung jeweils 1 Monat bei vorgegebenen Initialdruck gehalten und danach mit einer Druckaufbaurrate von 5 bar/d bis zum Maximaldruck von 278 bar befüllt. Für die anschließende Modellierung des Speicherbetriebes der Kaverne wurden ein in Anlehnung an konkrete Druckdaten ein typischer, realitätsnaher Druckverlauf abgeleitet (Abb. 8.17). Dabei wurde jeweils ein „moderates“ und ein „schnelles“ Nutzungsprofil vorgegeben. Der moderate Druckverlauf weist dabei einen gleichmäßigen Druckanstieg von ca. 1 bar/d bis zum Maximaldruck auf, während

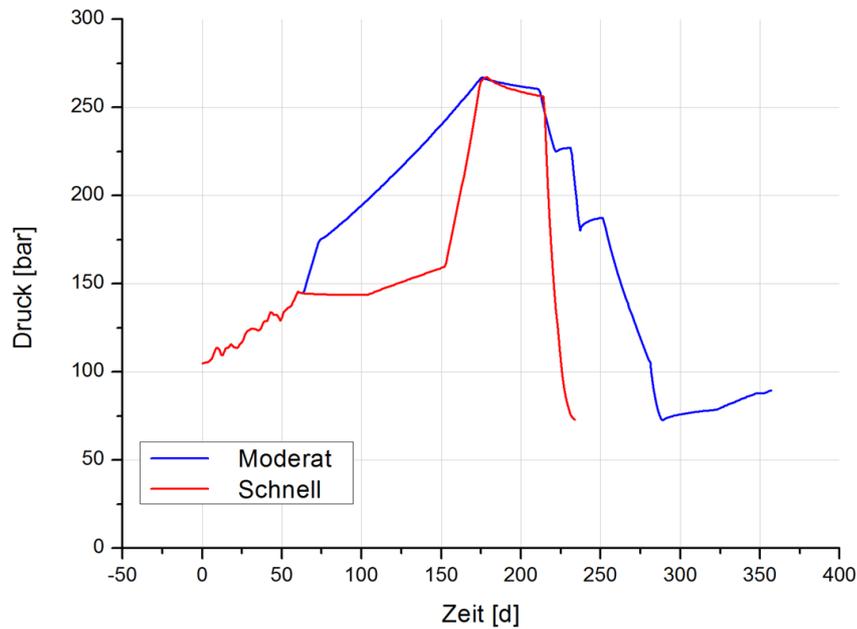


Abb. 8.17: Verschiedene modellierte Druckregimes in Anlehnung an reale Fahrweisen.

im schnellen Nutzungsprofil ein deutlich schnellerer Druckanstieg mit 4 bar/d auf eine relative lange Standzeit (≈ 150 d) bei lediglich ca. 150 bar folgt. Die charakteristischen Eckdaten dieser Varianten sind in der nachfolgenden Tabelle 8.1 für beide Kavernen zusammengestellt.

Tab. 8.1: Eckdaten der untersuchten Druckregimes (Abb. 8.17). Maximal- und Minimaldruck, sowie charakteristische mittlere Raten für Befüllung und Entleerung.

	P_{Max} [bar]	P_{Min} [bar]	Rate_+ [bar/d]	Rate_- [bar/d]
Moderat	278	73	1	2,5
Schnell	278	73	4	10

8.2.4 Berechnungsergebnisse

Drucktests bei verschiedenen Initialdrücken

Die Simulationen des Druckaufbaus ausgehend von einer vorherigen 1-monatigen Standzeit bei verschiedenen Startdrücken zeigt einen deutlichen Trend (Abb. 8.18): Je geringer der Initialdruck, d.h. je größer die Differenz zum angefahrenen Maximaldruck, umso stärker findet eine druckgetriebene Perkolation von Gas in das anstehende Steinsalz statt. Die Ursache hierfür liegt in der weiträumigen Spannungsverteilung, die eine längere

Standzeit bei niedrigem Druck nach sich zieht. Steigt der Gasdruck dann in der Folgezeit schneller an, als das umliegende Gebirge reagieren kann, kommt es durch die Verringerung der tangentialen Einspannung zur Perkolation von Gas in den Konturbereich der Kaverne.

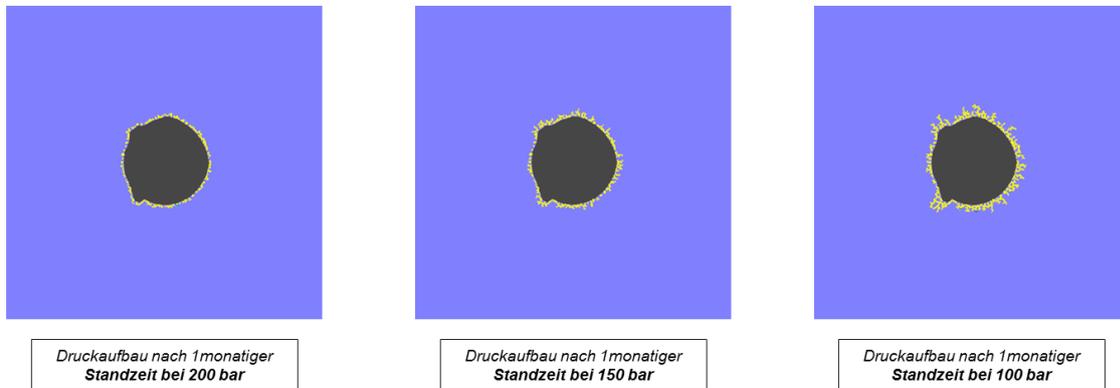


Abb. 8.18: Abhängigkeit der Gasperkolation vom Ausgangszustand bei gleicher Druckaufbaurrate und gleichem Maximaldruck.

Diese Interpretation wird dadurch unterstützt, dass bei einem Initialdruck von 200 bzw. 220 bar keinerlei Gasperkolation zu beobachten ist, obwohl mit gleicher Druckaufbaurrate der gleiche Maximaldruck von 278 bar angefahren wurde. Die Ergebnisse bestätigen damit die bereits früher getroffenen Empfehlungen für den Speicherbetrieb von Kavernen, dass die Standzeit bei geringem Speicherdruck möglichst zu begrenzen und nach längeren Phasen unter niedrigem Druck mit geringeren Druckaufbauraten zu arbeiten ist.

Simulation des Betriebes der Kaverne

Die Abbildung 8.19 zeigt die Ausbreitung der Fluidperkolation im Laufe von 5 Betriebszyklen mit moderatem Nutzungsprofil. In den ersten beiden Jahren zeigen sich nur sehr kleine Bereiche, in denen vereinzelt Gas in den unmittelbaren Kontursaum eindringt. Die fortwährende Be- und Entlastung durch das Hoch- und Herunterfahren des Druckes führt jedoch bei der Betrachtung über mehrere Jahre zu einer etwas deutlicher sichtbaren Gasperkolation, die jedoch in Bezug auf die numerische Genauigkeit des Modells nur wenige Elemente fortschreitet. Die Auswertung des klassischen Minimalspannungskriteriums, wie es in den kontinuumsmechanischen Berechnungen verwendet wurde, offenbart einen Vorteil der diskontinuumsmechanischen Simulation mit expliziter Berücksichtigung der Gesteinsmikrostruktur: Der Bereich, in denen das Minimalspannungskriterium verletzt wird, ist deutlich größer als das Gebiet, in das tatsächlich eine Gasperkolation stattfindet.

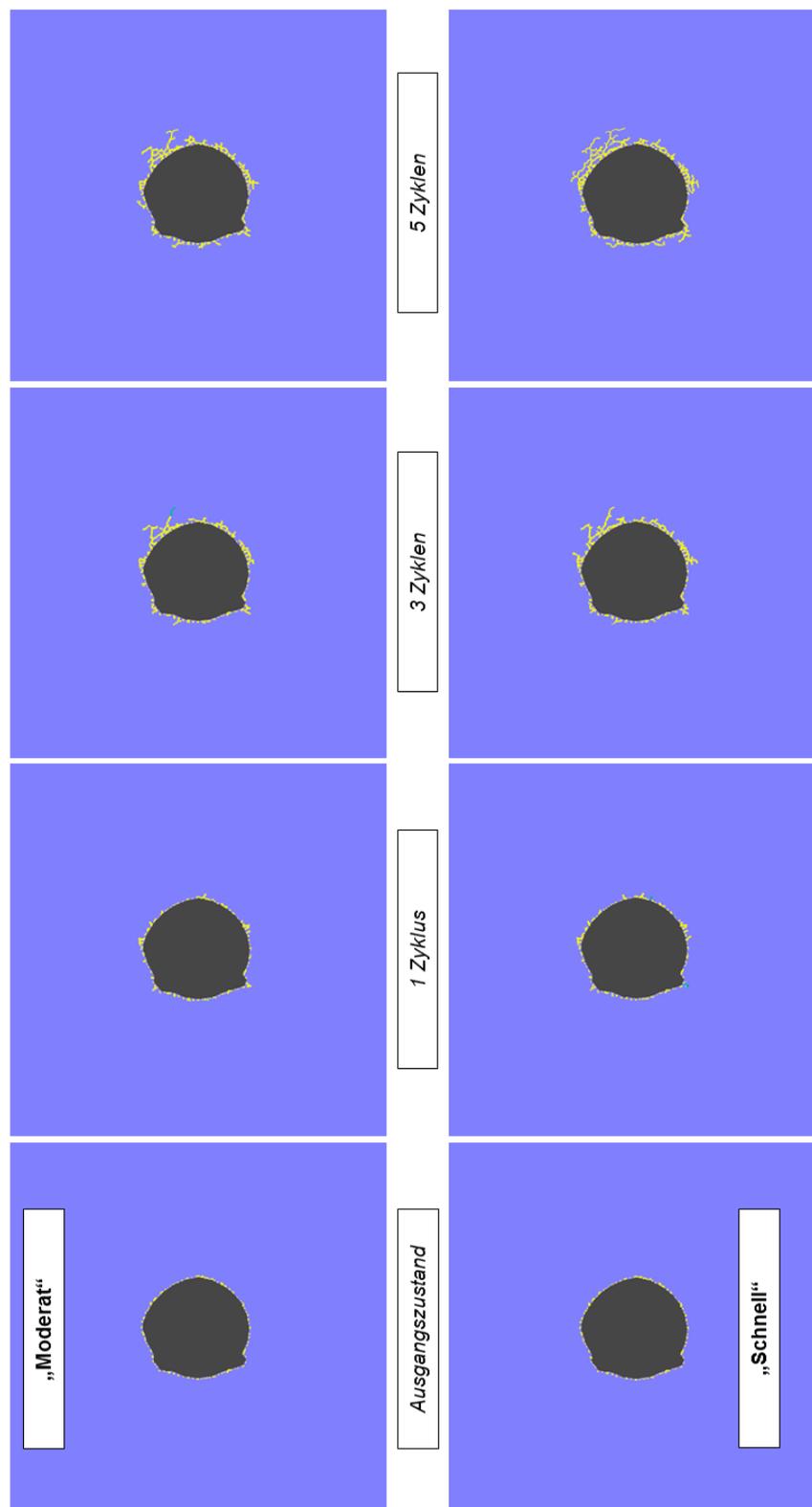


Abb. 8.19: Abhängigkeit der Gasperkolation vom Ausgangszustand bei gleicher Druckaufbaureate und gleichem Maximaldruck.

Die Ursache hierfür liegt in der Richtungsunabhängigkeit des Minimalspannungskriteriums, denn die Verletzung des Kriteriums wird im horizontalen Schnittmodell auch zum Teil durch verringerte radiale Einspannungen verursacht. Für die radiale Ausbreitung von der Kaverne weg müsste jedoch die tangentielle Einspannung geringer sein als der angreifende Gasdruck. Dies ist jedoch nur in der unmittelbaren Umgebung der Kavernenkontur der Fall (Abb. 8.20), sodass auch nur in diesen Bereich eine geringe Gasperkolation stattfindet. Die vergleichende Betrachtung des schnellen Nutzungsprofils zeigt vor dem Hintergrund

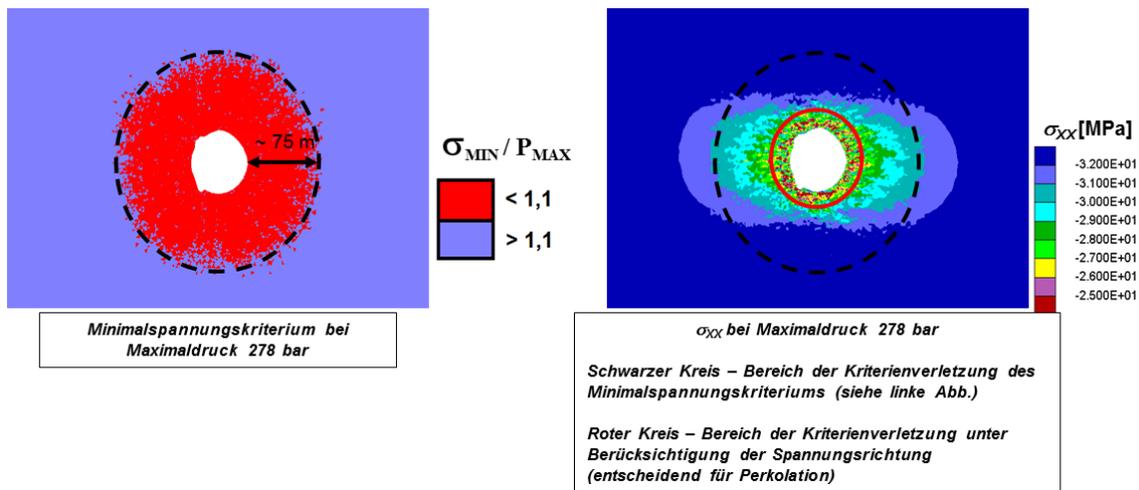


Abb. 8.20: Vergleich mit kontinuumsmechanischen Minimalspannungskriterium, Modell-ausschnitte 100x100m.

der einführenden Berechnungsvarianten das erwartete Verhalten: Aufgrund der längeren Standzeit bei Drücken ≤ 150 bar und der deutlich höheren Druckaufbaurrate kommt es gegenüber des moderaten Betriebes zu einer stärkeren Gasperkolation. Durch das etwas weitere Eindringen des Gases lässt sich beim ebenfalls schnelleren Herunterfahren des Gasdruckes ein weiterer Effekt beobachten: Durch das schnelle Herunterfahren sinken die Radialspannungen um die Kaverne abrupt ab. Wenn der Druckabfall schneller geschieht, als die Zeit die das perkolierte Gas benötigt um entlang der Korngrenzen wieder in die Kaverne zurückzuströmen, verbleibt ein Teil des Gases auf den Korngrenzen. Da der eingeschlossene Gasdruck dann höher sein kann als die absinkende radiale Einspannung beobachtet man beim Herunterfahren des Druckes eine Ausbreitung in tangentielle Richtung, parallel zur Kavernenkontur. Dieser Effekt könnte zwar zu zusätzlichen Abschalungen an der Kontur führen, ermöglicht aber ebenfalls aufgrund der Spannungsrichtungen keine Ausbreitung von der Kaverne weg.

8.2.5 Zusammenfassung

Der diskontinuumsmechanische Berechnungsansatz wurde verwendet, um die druckgetriebene Perkolation an Kavernenkonturen infolge des veränderten Anforderungsprofils der Druckregimes zu untersuchen. Die hydro-mechanisch gekoppelten Modellierungen zeigen, dass beim schnellen Hochfahren des Kavernendruckes Gas in die Konturzone der Kaverne verpresst wird. Die Eindringtiefe ist limitiert, aber aufgrund von Spannungsumlagerungen umso größer, je länger die vorhergehende Standzeit bei geringerem Kavernendruck war. In der Simulation mehrerer derartiger Betriebszyklen zeigte sich, dass die auf diese Weise induzierte Konturschädigungszone auf einen Bereich von wenigen Metern begrenzt bleibt.

In zukünftigen Studien können und sollten die Untersuchungen unter Berücksichtigung der zusätzlichen thermischen Expansion und Kopplung erfolgen. Weiterhin kann dies dann ebenfalls auf dreidimensionale Kavernenmodelle erweitert werden, wobei allerdings von einem deutlich größeren Rechenaufwand auszugehen ist.

8.3 Integrität der geologischen Barriere über einem Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flacher Lagerung

8.3.1 Einführung und grundlegende Aufgabenstellung

Die Endlagerung radioaktiver (wärmeentwickelnder) Abfälle ist seit Jahrzehnten ein aktives Forschungsfeld unter besonderer politischer und sozialer Aufmerksamkeit. Unter den verschiedenen Endlagerkonzepten wird auch die Möglichkeit der dauerhaften Einlagerung der Abfallgebinde in einer Salinarformation aufgrund des Einschluss- und Kriechvermögens des Salzgesteines in Betracht gezogen [86]. Die in Abschnitt 2.3 vorgestellten natürlichen Analogie aus dem Steinsalzbergbau zeigen, dass Gase und Flüssigkeiten über Millionen Jahre eingeschlossen werden können, weshalb die Ausnutzung eben jener Eigenschaften im Mittelpunkt der Endlagerungskonzepte im Salz steht. In den nachfolgenden Betrachtungen untersuchen wir insbesondere die sog. Streckenlagerung in der flachen Lagerung. Die Grundidee ist hierbei die folgende: Die wärmeentwickelnden Abfälle werden in einem eigens hierfür aufgefahrenen Streckennetzwerk unter Tage eingebracht und der verbleibende Raum zwischen Behältern und Streckenwand mit Salzgrus verfüllt. Durch das Kriechvermögen des Salzgesteines – besonders ausgeprägt unter hohen Temperaturen – wird der Hohlraum langfristig verschlossen und der Salzgrus derart kompaktiert, dass er zunehmend die Eigenschaften von ungeschädigtem Steinsalz annimmt und somit zum Teil des Langzeitverschlusses wird. Im Rahmen eines Langzeitsicherheitsnachweises wäre – neben zahlreichen anderen Untersuchungen – u.a. zu zeigen, dass unter diesen Bedingungen die Integrität der geologischen Barriere erhalten und die Abfälle somit isoliert von der Biosphäre bleiben [87]. Anhand von gekoppelten thermo-hydro-mechanischen Berechnungen werden nachfolgend derartige Betrachtungen als Anwendungsbeispiel am vereinfachten Szenario einer idealisierten flachen Lagerungsstruktur durchgeführt.

8.3.2 Modellaufbau einer idealisierten flachen Lagerung

Das Berechnungsmodell stellt eine vereinfachte geologische Struktur der flachen Lagerung mit perfekt horizontalen Schichtgrenzen dar (Abb. 8.21).

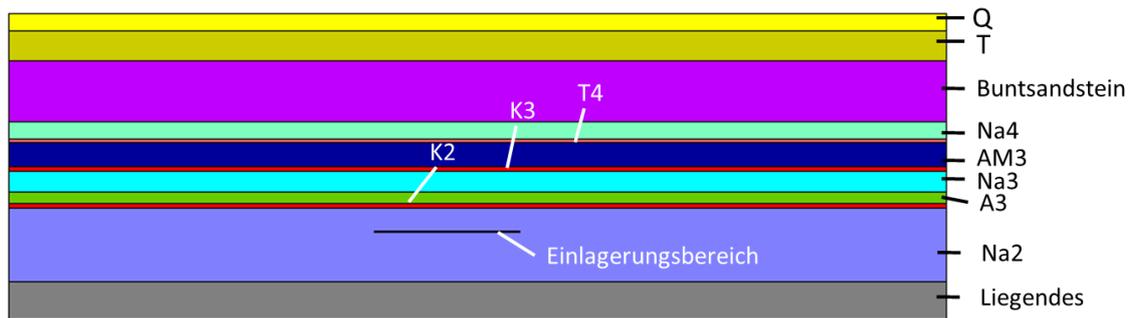


Abb. 8.21: Modell der idealisierten flachen Lagerung für die Streckenlagerung wärmeentwickelnder Abfälle.

Der geologische Aufbau ist ohne lokationsspezifische Inhalte angelehnt an typische Salzlagerstätten in Deutschland (Tab. 8.2)[88].

Name	Kurzname	Mächtigkeit [m]
Quartär	Q	60
Tertiär	T	100
Buntsandstein	Buntsandstein	200
Aller-Steinsalz	Na4	60
Roter Salzton	T4	10
Anhydritmittelsalz	AM3	90
Kaliflöz Ronnenberg	K3	15
Leine-Steinsalz	Na3	70
Hauptanhydrit	A3	40
Kaliflöz Staßfurt	K2	15
Staßfurt-Steinsalz	Na2	260
Liegendes	Liegendes	130

Tab. 8.2: Stratigraphische Schichten und deren Mächtigkeiten im Modell der idealisierten flachen Lagerung

Die thermo-mechanischen Eigenschaften der Gesteine sowie die planungstechnischen Randbedingungen der Endlagergeometrie wie z.B. Streckenabstände und -verfüllung werden mit geringen Modifikationen in Anlehnung an die Untersuchungen zur vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben [89, 90] festgelegt. Die Anlagen B.7 bis B.11 enthalten Tabellen und Darstellungen zu den angesetzten Materialparametern sowie Behälter- und Streckengeometrien. Die seitlichen und der untere Modellrand werden in Normalrichtung fixiert und ein initiales Temperaturfeld mit einem Temperaturgradienten von 3 K pro 100 m ausgehend von einer mittleren Oberflächentemperatur von 8,5 °C angesetzt.

8.3.3 Wärmeentwicklung und Versatzmodell

In der geomechanischen Simulation wird die Streckenlagerung von Pollux-10 Behältern untersucht. Die langzeitige Entwicklung der Wärmeleistung durch den anhaltenden Zerfall der Radionuklide wurde durch die Überlagerung des Zerfalls von 5 sog. „Pseudonukliden“ angepasst [89]. Damit berechnet sich die Wärmeleistung zum Zeitpunkt t nach Reaktorentnahme demnach folgendermaßen:

$$P(t) = \sum_{i=1}^5 P_i^0 \cdot \exp \left[-\ln 2 \cdot \frac{t}{t_{1/2}} \right] \quad (8.8)$$

wobei P_i^0 die Initialleistung des jeweiligen Pseudonuklides und $t_{1/2}$ dessen Halbwertszeit ist (Anlage B.12).

Diese zeitabhängige Wärmeleistung wird im Modell auf den Behältern vorgegeben. Aufgrund der Verwendung eines 2D-Schnittes werden in laterale Richtung implizit unendlich ausgedehnte Einlagerungsbehälter modelliert. Im realen Planungskonzept befindet sich zwischen den ca. 5,5 m langen Behältern in dieser Richtung ein Abstand von etwa 3 m, d.h. auf lange Sicht würde die Approximation unendlicher Behälter eine Überbewertung der Temperaturentwicklung mit sich führen. Aus diesem Grund wird die Wärmeleistung im Modell im Verlauf der ersten 5 Jahre nach Einlagerungsbeginn auf ca. 75% reduziert, um den Einfluss des lateralen Behälterzwischenraumes zu berücksichtigen und damit gleichzeitig eine annähernde Übereinstimmung mit der modellierten Temperaturentwicklung in 3D-Auslegungsrechnungen [90] zu erzielen.

Die Wärmeentwicklung und das Versatzverhalten sind dabei untrennbar miteinander verbunden: Je höher die Temperatur, desto schneller wird der Versatz durch das beschleunigte Zukriechen der Einlagerungskammer kompaktiert, wodurch wiederum dessen Wärmeleitfähigkeit steigt. Mit zunehmender Wärmeleitfähigkeit kann die Wärme besser vom Behälter abtransportiert werden, was der weiterlaufenden Erhitzung der Behälter entgegenwirkt. Wir sehen also ein enges Wechselspiel zwischen thermischen und mechanischen Eigenschaften, weshalb die realitätsnahe Abbildung des Versatzverhaltens von zentraler Bedeutung für das Verhalten im Nahbereich der Einlagerungskammern ist¹.

Hierfür wurde eine eigens geschaffene Modifikation des „Double-Yield“-Versatzmodells [50] verwendet, um die temperatur- und geschwindigkeitsabhängige Kompaktion des Salz-

¹Für die Integrität der geologischen Barriere ist dahingegen vorwiegend der integrale Wärmeeintrag im Einlagerungsbereich relevant.

grus adäquat abzubilden. In seiner ursprünglichen Form beschreibt das Double-Yield-Modell ein Material mit zwei Festigkeitsgrenzen: Eine Schergrenze in Abhängigkeit von deviatorischer und minimaler Hauptspannung und eine druckabhängige volumetrische Fließgrenze zur Modellierung von Kompaktionsverhalten. Das Kompaktionsverhalten kann dabei durch die Vorgabe einer experimentell ermittelten Versatzdruckkurve abgebildet werden.

Aus Kompaktionsversuchen an Salzgrus hat sich jedoch gezeigt, dass sich die Kompaktion nicht durch eine einzelne Versatzdruckkurve beschreiben lässt, sondern vielmehr eine starke Abhängigkeit von Verformungsgeschwindigkeit und Temperatur besteht [91, 92](Anlage B.13). Um diesem Verhalten gerecht zu werden, wurde das Double-Yield-Modell derart modifiziert, dass keine konstante Versatzdruckkurve mehr verwendet wird, sondern diese sich jeweils dynamisch aus der aktuellen Geschwindigkeit und Temperatur ergibt. Die Parametrisierung wurde dabei so angepasst, dass die Versatzdruckkurven der experimentellen Kompaktionsversuche bei gegebener Geschwindigkeit und Temperatur repliziert werden.

Die Wärmeleitfähigkeiten der Gesteinsschichten sowie des Salzgrusversatzes wurden gemäß Anlage B.9 gewählt [90]. Für Steinsalz wurde dabei die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit λ_S gemäß Gl. (8.9) berücksichtigt [93]:

$$\lambda_S(T) = \frac{6,1 \text{ W/mK}}{1 + 0,0045 \text{ K}^{-1} \cdot T} \quad (8.9)$$

Für den Salzgrus ist die Wärmeleitfähigkeit λ_{CS} zusätzlich abhängig vom Kompaktionsgrad. Diese bewegt sich mit zunehmender Kompaktion gegen die Leitfähigkeit des ungestörten Steinsalzes und hat bei hohen Porositäten η noch zusätzliche Anteile λ_R durch Wärmestrahlung im Porenraum [91]:

$$\lambda_{CS}(\eta, T) = \frac{\eta}{\eta_0} \cdot \lambda_R(T) + \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right)^{1,14} \cdot \lambda_S(T) \quad (8.10)$$

mit

$$\lambda_R(T) = 0,42 \text{ W/mK} + T \cdot 0,0027 \text{ W/mK}^2 \quad (8.11)$$

Analog wird die spezifische Wärmekapazität c_{CS} des Salzgrus in Abhängigkeit der Kompaktion relativ zu der des ungestörten Steinsalzes c_S beschrieben:

$$c_{CS} = c_S \cdot (1 - \eta) \quad (8.12)$$

Die Ausgangsporosität des Salzgrusversatzes nach Einlagerung wird mit $\eta_0 = 0,35$ angesetzt.

8.3.4 Ergebnisse der thermo-hydro-mechanisch gekoppelten Berechnungen

Der Einlagerungsvorgang wurde konservativ folgendermaßen vereinfacht: Auf eine zweijährige Standzeit der Kammern unter freier Konvergenz folgt das instantane Einlagern und Versetzen aller Behälter und Strecken. Durch diese konservative Annahme wird die initiale Wärmeleistung am konzentriertesten auf die geologische Barriere wirken und nicht über einen langen Einlagerungszeitraum verschmiert.

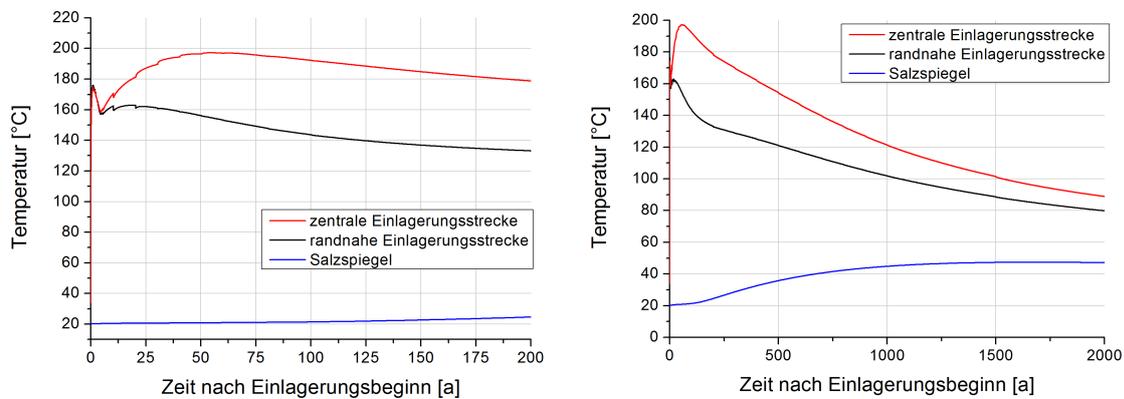


Abb. 8.22: Modellierter Temperaturverlauf an Behälteroberflächen und Salzspiegel.

Abb. 8.22 zeigt den Temperaturverlauf an der Behälteroberfläche in jeweils einer zentralen und einer am Rande des Endlagers gelegenen Einlagerungsstrecke. Das erste Jahr nach Einlagerungsbeginn wird dominiert vom schnellen Aufheizen der Behälter, die vom gering kompaktierten und damit wenig leitfähigen Salzgrus umgeben sind. Mit zunehmender Zeit und Temperatur steigt die Kompaktion und Leitfähigkeit des Salzgrus, während die Wärmeleistung kontinuierlich abnimmt. Die Temperatur an der Behälteroberfläche zeigt – unabhängig ob Randstrecke oder zentrumsnah – einen ersten Peak bei ca. 175 °C und nimmt nachfolgend durch den besseren Wärmeabfluss ab. Nach ca. 5 Jahren überlappen

sich die Temperaturfelder benachbarter Kammern immer mehr, wodurch die Temperatur am Behälter wieder zunimmt. Dieser Effekt ist erwartungsgemäß für die am Rand liegenden Strecken geringer als im Zentrum des Einlagerungsbereiches. Nach Erreichen des Maximums stellt sich im Modell ein degressiver Temperaturverlauf ein, der zunächst mit einer annähernd konstanten Abnahmerate von ca. 7 K pro 100 Jahren geschieht. In Anlage B.14) werden ergänzend die Temperaturfelder zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Für die Einlagerungsstrecken in Randlage des Endlagers gilt ein qualitativ ähnlicher Temperaturverlauf, allerdings bei etwas geringeren Temperaturen.

Die mechanische Reaktion auf die starke Erwärmung äußert sich durch die Ausdehnung der Salzgesteine um das Endlager. Hierdurch werden die hangenden Schutzschichten nach oben gedrückt. Im vereinfachten Fall der homogenen Schutzschicht aus Leine-Steinsalz bildet sich somit an der Oberkante des Salinars eine Entspannungszone durch die Reduktion der horizontalen Einspannung. Dieser Effekt lässt sich am besten an der Biegung eines Balkens veranschaulichen (Abb. 8.23). Durch die Einspannungsreduktion kann es dazu

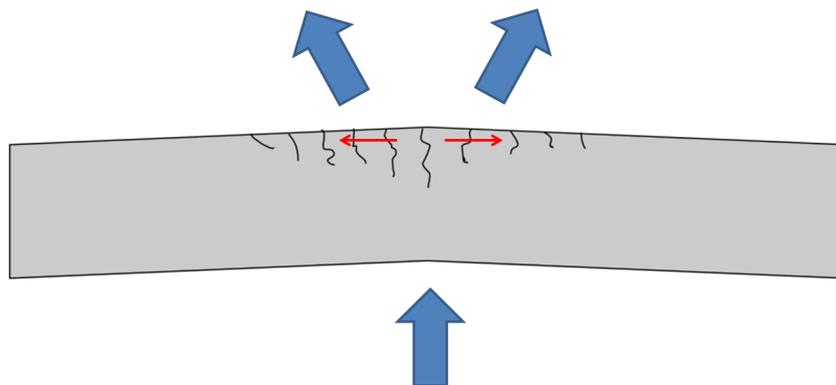


Abb. 8.23: Prinzipskizze des hebungsinduzierten Biegezugeffektes an der Oberkante eines Balkens.

kommen, dass die Horizontalspannung am Salzspiegel kleiner wird als der Fluiddruck des anliegenden Grundwassers, wodurch es zu einer druckgetriebenen Perkolations von Gebirgschwässern in die hydraulische Schutzschicht kommen kann. Die Auswertung des konventionellen Minimalspannungskriteriums (Vgl. Abschnitt 8.1) zeigt 30 Jahre nach Einlagerungsbeginn eine Verletzungszone, die ca. 60 m in das Salzgestein hineinreicht (Abb. 8.24).

Es wurde bereits darauf hingewiesen, dass das Minimalspannungskriterium ein notwendiges, aber nicht hinreichendes Kriterium für den lokalen Integritätsverlust darstellt, d.h.

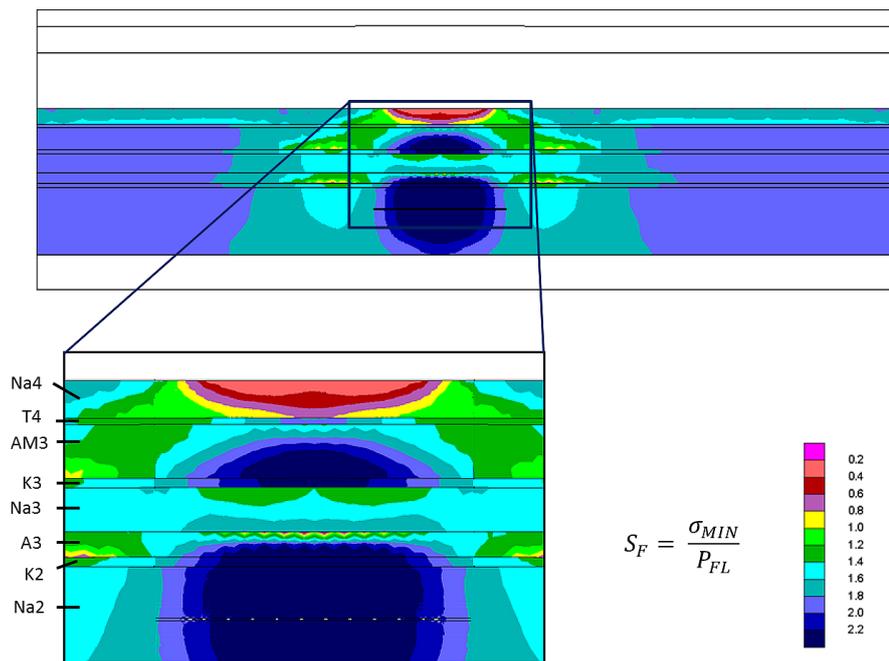


Abb. 8.24: Minimalspannungskriterium 30 Jahre nach Einlagerungsbeginn.

die Verletzung des Minimalspannungskriteriums führt nicht zwingend zur druckgetriebenen Perkolation, wenn die Spannungsrichtungen nicht kompatibel sind. In diesem Falle führt die Reduktion der horizontalen Einspannung jedoch dazu, dass Fluide vom Salzspiegel vertikal in die Barriere eindringen könnten.

In der thermo-hydro-mechanisch gekoppelten Situation wird dies durch explizite Nachrechnung unter Verwendung der diskontinuumsmechanischen Methode bestätigt. Wir beobachten eine druckgetriebene Perkolation in die hydraulische Barriere, deren Eindringtiefe weitestgehend mit der der Verletzung des Minimalspannungskriteriums übereinstimmt (Abb. 8.25). Auffällig ist, dass die Integritätsverletzung auf das Aller-Steinsalz beschränkt bleibt, während der darunterliegende Rote Salzton signifikant höhere Horizontalspannungen aufweist und somit eine abdichtende Wirkung auszuüben scheint. Aus dem Blickwinkel der Integritätsbetrachtung des Endlagers ist allerdings zu betonen, dass diese Integritätsverletzung örtlich und zeitlich begrenzt bleibt. Mit zunehmender Zeitdauer führen ausgleichende Kriechprozesse und die abnehmende thermische Last zu einer erneuten Zunahme der minimalen Hauptspannungen, wodurch die Verletzung des Minimalspannungskriteriums 120 Jahre nach Einlagerungsbeginn wieder verschwindet (Abb. 8.26). Selbst zum Zeitpunkt der ausgeprägtesten Spannungsreduktion ca. 30 Jahre nach Einlagerungsbeginn verbleibt über dem modellierten Endlager eine massive ungeschädigte Salinarbarriere mit einer

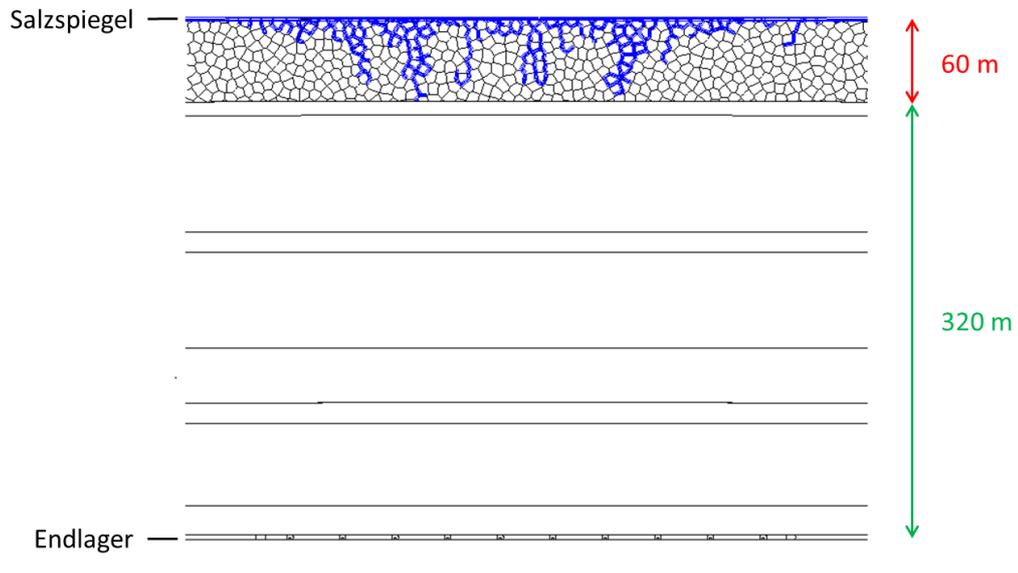


Abb. 8.25: Druckgetriebene Perkolations am Salzspiegel infolge der thermisch induzierten Hebung 30 Jahre nach Einlagerungsbeginn.

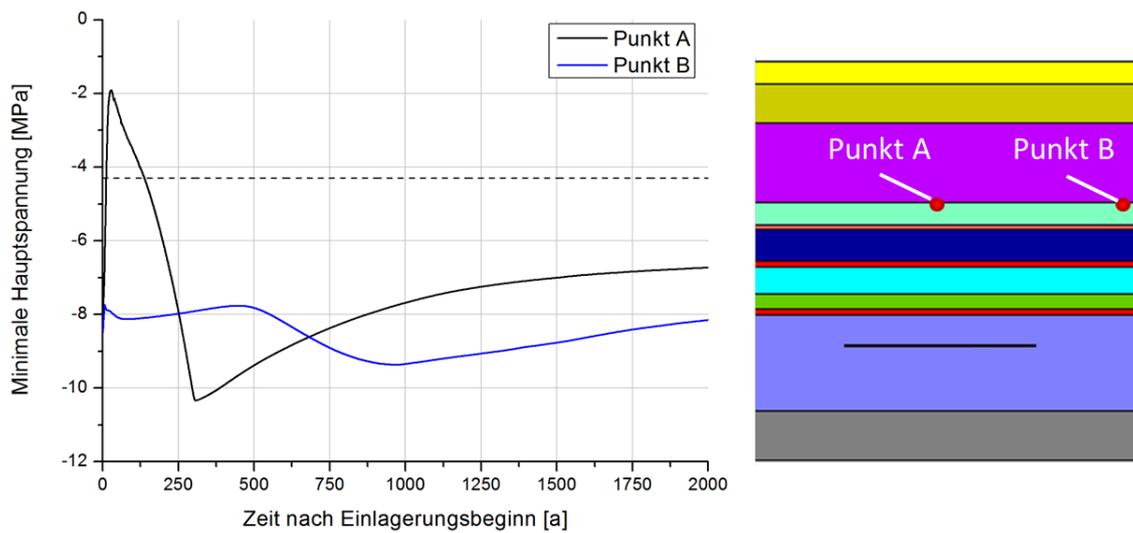


Abb. 8.26: Verlauf der minimalen Hauptspannungen an zwei Punkten im Salinar entlang des Salzspiegels.

Mächtigkeit von über 300 m. Infolge der Einlagerung zeigt sich auch an der Tagesoberfläche ein langsamer Hebungsprozess, der nach 1000 Jahren ein Maximum von etwa 2,4 m erreicht (Vgl. ergänzende Abbildungen in Anlage B.15 und B.16).

8.3.5 Zusammenfassung

Die thermische Expansion im Einlagerungshorizont führt zu einem lokalen Hebungsprozess, welcher wiederum die horizontale Einspannung an der Oberkante der hydraulischen Schutzschicht reduziert. Die Simulation bildet dies anhand der expliziten druckgetriebenen Perkolation von Deckgebirgswässern in die Region der Spannungsreduktion bei guter Übereinstimmung mit dem kontinuumsmechanischen Minimalspannungskriterium ab. Der Effekt bleibt lokal auf die oberste Salzschieht (ca. 60 m) begrenzt und ist etwa 100 Jahre nach Einlagerungsbeginn bereits wieder abgeklungen. Darüber hinaus deutet die beobachtete Einspannung im Roten Salzton auch mögliche Vorteile eines Multibarrierensystems im Salinar zur Endlagerung wärmeentwickelnder Abfälle an.

Basierend auf dem vorliegenden, einfachen Modell der flachen Lagerung konnten die thermo-hydro-mechanisch gekoppelten Effekte in der geologischen Barriere infolge der Einlagerung wärmeentwickelnder Abfälle also qualitativ plausibel abgebildet werden. Es sei jedoch betont, dass es sich hierbei lediglich um eine generische Beispielstudie zur praxisnahen Anwendung der in dieser Arbeit vorgestellten diskontinuumsmechanischen Modellierung von Salzgesteinen handelt. Für quantitative Aussagen müssen derartige Betrachtungen anhand konkreter Information zur lokationsspezifischen Geologie, den Materialeigenschaften der beteiligten Gesteine und dem angesetzten Einlagerungskonzept durchgeführt werden.

Kapitel 9

Optimierungsperspektiven und weitere Entwicklung

9.1 Einschränkungen in 3DEC & UDEC

Die in dieser Arbeit vorgestellten Anwendungen und Resultate vermitteln einen Einblick in die vielfältigen Möglichkeiten der diskontinuumsmechanischen Methodik, mit deren Hilfe zahlreiche zentrale Mechanismen des Verhaltens von Steinsalz unter mechanischer und hydraulischer Belastung realitätsnah abgebildet werden können, die sich unter konventionellen kontinuumsmechanischen Behandlungen kaum reproduzieren ließen.

Nichtsdestotrotz existieren im gegenwärtigen Zustand noch Einschränkungen, deren Auflösung sich sowohl im Sinne der Optimierung des Rechenaufwandes als auch der Beschreibung des Bruchmechanismus auswirken könnte. Die strengste Beschränkung ist hierbei wohl die Forderung der Unzerteilbarkeit bestehender Blöcke, d.h. dass die bestehenden Voronoi-Kristalle nicht weiter in kleinere Kristalle zerlegt werden können. Würde man also z.B. die Simulation der einachsialen Druckversuche in Kapitel 7 bis zur Feinheit der realen Korngeometrie durchführen wollen, so müsste bereits eine dementsprechend feine Initialgeometrie mit enormer Blockanzahl und sehr feiner Vernetzung erstellt werden. Die zugehörigen Rechenzeiten lägen damit zweifelsohne jenseits der vertretbaren Möglichkeiten, ohne dass außer einem feineren Bruchbild ein signifikanter qualitativer und quantitativer Unterschied zur deutlich gröberen Simulation zu erwarten ist. Dennoch erfordert die Unzerteilbarkeit der bestehenden Blöcke zusätzlich numerische Behandlungen, die die Trennung von Verfestigung der Kristallmatrix und Entfestigung über die Korn-

grenzen erschwert. Im Rahmen einer durchweg konsistenten Behandlung sollte auch die intrakristalline Rissbildung berücksichtigt werden können und ein stark verformter Kristall letztendlich auch in mehrere kleinere Blöcke zerfallen können.

Während diese Argumente für die Notwendigkeit von dynamischen Verfeinerungen und Zerlegungen der Blockstruktur sprechen, lässt sich aus Sicht der numerischen Optimierung zusätzlich auch ein gegenläufiger Effekt motivieren: Da die elasto-visko-plastische Reaktion bei Spannungszuständen deutlich unterhalb des Prüfkörpersversagens noch hauptsächlich über die Verfestigung der Kristallmatrix selbst abläuft, ist die Berechnung einer enormen Anzahl von Korngrenzwechselwirkungen in diesen Bereich möglicherweise gar nicht nötig, da die dort wirkenden Scher- und Normalspannungen näherungsweise den Werten entsprechen sollten, die sich unter Berücksichtigung der Korngrenzenorientierung aus dem Spannungszustand der Matrix ergeben.

In Analogie zum Konzept der adaptiven Netze in FEM bzw. XFEM-Ansätzen (Vgl. Kapitel 9.2) liegt es also nahe, die Feinheit des Berechnungsnetzes während der Simulation dynamisch derart anzupassen, dass die Vernetzung und Blockstruktur in Regionen starker Beanspruchung entsprechend verfeinert wird, während das Modell bzw. der Berechnungsalgorithmus wenig belastete Bereiche entsprechend vergrößert. Derartige Konzepte wurden inklusive Rissausbreitungsmodellierungen bereits in einigen neuartigen Berechnungskonzepten auch unter Berücksichtigung einer vordefinierten Mikrostruktur erfolgreich angewandt [94] und sollen als Ausblick auf mögliche Optimierungen und Weiterentwicklungen nachfolgend kurz umrissen werden.

9.2 Alternative Methoden

9.2.1 Combined Finite-Discrete-Element (FEM/DEM)

Wie die Bezeichnung schon vermuten lässt, wählt der FEM-DEM-Ansatz ähnlich zur diskontinuumsmechanischen Methodik in UDEC/3DEC eine Kombination von finiten und diskreten Elementen [95]. Die Besonderheit besteht hierbei allerdings darin, dass die kontinuumsmechanischen Elemente hierbei nicht mehr der Einschränkung der „Unzerteilbarkeit“ unterliegen. Zusätzlich zur Wechselwirkung zwischen verschiedenen diskreten Blöcken erfolgt im FEM/DEM-Ansatz eine weitere Wechselwirkungsebene, bei der nun auch die einzelnen finiten Elemente in sich unabhängig und über Federgesetze verbunden sind (Abb.

9.1). Für diese Verbindungen könnten dann eigene, zusätzliche Stoffgesetze angewendet werden, um die intrakristalline Zertrümmerung abzubilden.

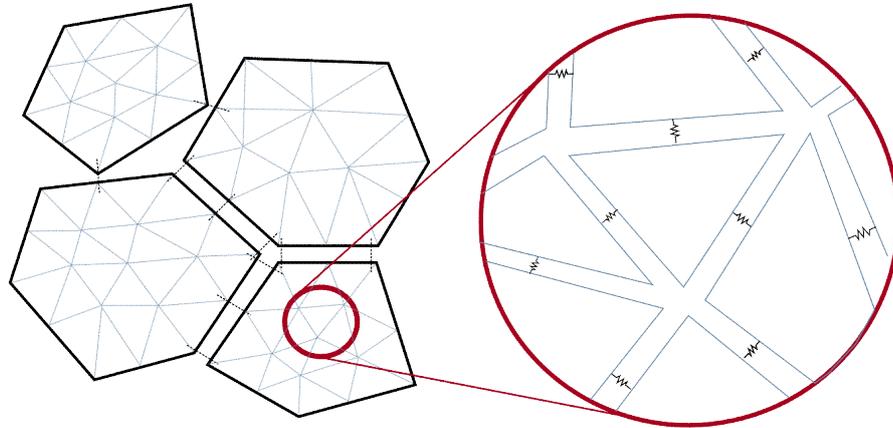


Abb. 9.1: Zusätzliche Wechselwirkung zwischen einzelnen finiten Elementen im FEM/DEM-Ansatz.

Aus dem Blickwinkel der diskontinuumsmechanischen Modellierung in dieser Arbeit entspräche das z.B. einem Voronoi-Modell bei dem jede kontinuumsmechanische Zone eines Salzkristalles als separater Block aufgefasst werden würde und unterschiedliche Scher- und Zugfestigkeiten für die inter- und intrakristallinen Kontakte angesetzt werden würden.

In der ursprünglichen Form der FEM/DEM-Implementation wird nicht explizit auf polykristalline Körper Bezug genommen, wodurch die Diskretisierungsebene der Korn-grenzstruktur fehlt. Der verfestigende Ast einer typischen Spannungs-Verformungskurve wird in analoger Art und Weise zu der in dieser Arbeit vorgestellten Methodik durch die kontinuumsmechanische Beschreibung auf Blockebene vorgenommen. Die Entfestigung wird dann basierend auf der Öffnungsweite und Scherverschiebung zwischen den kontinuumsmechanischen Elementen beschrieben. Wir erkennen also eine große Ähnlichkeit der Ansätze und können dementsprechend folgende Erweiterung der diskontinuumsmechanischen Beschreibung von Salzgesteinen durch Voronoi-Strukturen vorschlagen:

- Kontinuumsmechanische Beschreibung der Verfestigung der Salzkristalle (**Block-Ebene**)
- Diskontinuumsmechanische Rissbildung und Dilatanz durch Öffnung und Scherbe-wegung von Korngrenzen (**Korngrenz-Ebene**)

- Kristallzertrümmerung im Nachbruchbereich durch intrakristalline Rissbildung (**Zonen-Ebene**)

Die Modellierung der intrakristallinen Rissbildung durch den Wegfall der „Unzerteilbarkeit“ der Salzkristalle ist allerdings mit zusätzlichen Anforderungen und Einschränkungen verbunden [96]:

1. Rissbildungsrichtung nur entlang der vorliegenden Netzkanten und damit abhängig von dessen Orientierung
2. Auflösung des Spannungsfeldes an der Rissspitze erfordert hohe Auflösung und damit großen Rechenaufwand
3. Ein intrakristallines Risskriterium muss abgeleitet werden

Die kombinierte FEM/DEM-Methode ist also mit zahlreichen Möglichkeiten gesegnet, die allerdings auch mit zusätzlichem numerischen und theoretischen Aufwand verbunden sind. Im Hinblick auf die numerischen Schwierigkeiten, die sich aus der offensichtlichen Abhängigkeit der intrakristallinen Rissbildung von Feinheit und Orientierung des Berechnungsnetzes ergeben, wird im nachfolgenden Kapitel eine potentielle Lösung vorgestellt und diskutiert.

9.2.2 Adaptive Vernetzung mit Übergang von Kontinuum zu Diskontinuum

Im Rahmen der Optimierung von Computersimulationen über gitterbasierte Methoden ist man aufgrund der starken Abhängigkeit von der Elementanzahl stets auf der Suche nach der größten Vernetzung, die gleichzeitig immernoch eine bestimmte Genauigkeitsvorgabe erfüllt. Dies bedeutet im Kontext geomechanischer Simulation, dass die höchste Netzauflösung typischerweise dort angesetzt wird, wo die größten Spannungsgradienten zu erwarten sind, z.B. an Pfeilern, Kavernenkonturen oder Abbaukanten. Während sich diese nachvollziehbare Vorgehensweise über viele Jahrzehnte etabliert hat, ist sie streng genommen sowohl im Sinne der Optimierung als auch für die simulierte Physik aus zwei Gründen problematisch: Zum einen wird dabei möglicherweise eine viel zu feine Vernetzung in wenig belasteten Bereichen mitgeführt, die die Berechnung ohne Mehrertrag verlangsamt, und zum anderen muss beim Modellaufbau schon in gewissem Maße „hereingesteckt“ werden,

welche Bereiche möglicherweise kritisch sind und einer hohen Auflösung bedürfen. Somit kann das Modell mit seinem a-priori generiertem Netz eventuell zu fein in irrelevanten und zu grob in kritischen Regionen sein.

Wie bereits in Kapitel 3.2 kurz angesprochen können einige kontinuumsmechanische Simulationscodes durch sogenanntes „Remeshing“ eine Netzanpassung vornehmen, jedoch benötigen wir für den diskontinuumsmechanischen Ansatz eine Methode, die auch den Übergang vom kontinuierlichen zum diskreten Berechnungsmodell erlaubt. Ein Lösungsansatz für diese Problematik wurde im Rahmen der adaptiven Computergrafik vorgestellt [94, 97]: Die Grundidee besteht zunächst in Anlehnung an konventionelles Remeshing darin, dass Berechnungsnetz in gewissen Zeitabständen nach vordefinierten Kriterien anzupassen, sodass die simulierten Bereiche automatisch vergrößert oder verfeinert werden. Das Kriterium kann hierbei je nach Anwendungsfall beispielsweise die Geschwindigkeit, der Spannungsgradient oder der Abstand zu bestimmten Objekten sein. Mittels eines Tensorfeldes \mathbf{M} wird für jede Vernetzungskante zwischen den Gitterpunkten i und j eine Metrik definiert:

$$s(i, j)^2 = \mathbf{u}_{ij}^T \left(\frac{\mathbf{M}_i + \mathbf{M}_j}{2} \right) \mathbf{u}_{ij} \quad (9.1)$$

wobei $\mathbf{u}_{ij} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j$. Es wird dann für jede Kante geprüft, ob $s(i, j)^2 < 1$. Falls nicht, wird die Netzkante durch vorgegebene Operationen geteilt, die die Gittertopologie erhalten. Welche Kanten von dieser Verfeinerung betroffen sind, wird dabei von Messtensor \mathbf{M} bestimmt, der je nach Zielstellung formuliert bzw. aus verschiedenen Anteilen definiert wird. So würde z.B. eine Geschwindigkeitskriterium eingeführt durch:

$$\mathbf{M}_{vel} = \frac{\nabla \mathbf{v}^T \nabla \mathbf{v}}{\Delta v_{max}^2} \quad (9.2)$$

Der genaue Ablauf dieses Verfahrens ist dabei deutlich komplizierter, als es diese vereinfachte Darstellung vermuten lässt. Es muss sichergestellt werden, dass durch die neuen Gitterpunkte keine unnatürlichen Artefakte entstehen bzw. durch die Netzvergrößerung keine plastische Verformung verlorengeht. Weitere Metriken, Anwendungsfälle sowie genauere Ausführungen zum Verfeinerungs- und Vergrößerungsalgorithmus werden ausführlich in [97] beschrieben. Dabei wird auch darauf eingegangen, dass trotz des komplexen Remeshing-Algorithmus nur ca. 1-5% der Rechenzeit hierfür aufgewendet werden. Daher bleibt diese Methodik auch insbesondere für großräumige geomechanische Aufgabenstellungen mit Anforderungen an Spannungsgradienten interessant.

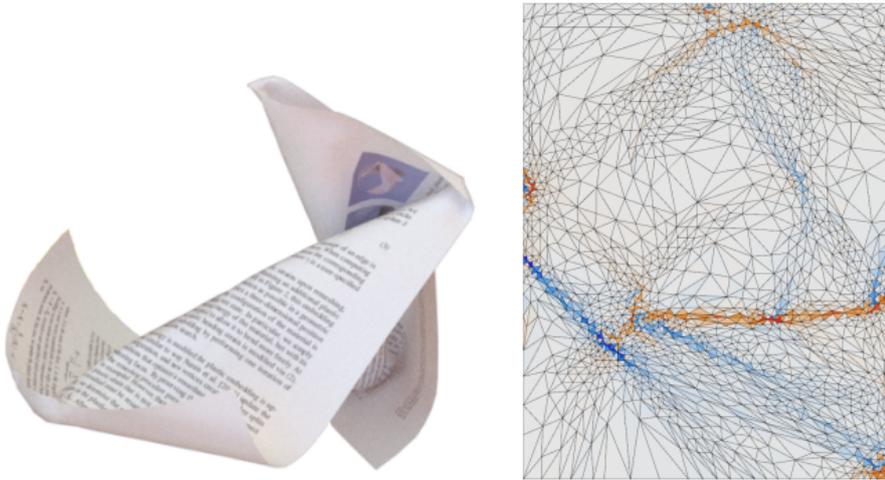
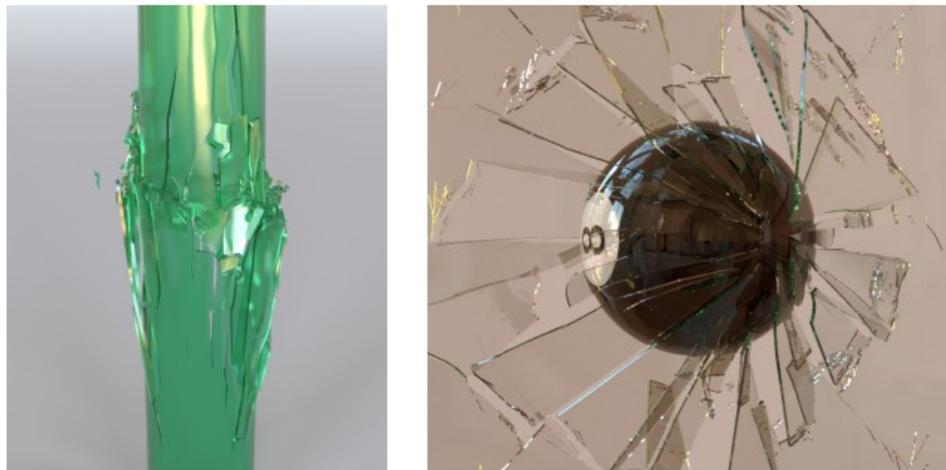


Abb. 9.2: Angepasste Vernetzung einer zerknitterten Papiersseite nach [46].

Basierend auf dieser Remeshing-Technologie wurde nun von Pfaff et al. [94] die Möglichkeit des Übergangs zum diskontinuierlichen Aufreißen des Materials entwickelt. An jedem Gitterpunkt werden die Scher- und Normalspannungen für verschiedene Orientierungen ermittelt und geprüft, ob die Scher- oder Zugfestigkeit des Materials überschritten wird. Falls ja, wird zunächst die Vernetzung so angepasst, dass die (noch kontinuumsmechanische) Netzkante auf der ermittelten Scherbahn liegt. Danach wird das Material am betroffenen Gitterpunkt entlang der angepassten Netzkanten aufgeteilt. Da Pfaff et al. außer einer einfachen Abstoßungsabfrage kein zusätzliches Scherverhalten entlang des Risses berücksichtigen, müsste dies für geomechanische Anwendungen noch in Form von Kontakten in Analogie zu UDEC & 3DEC implementiert werden. Letztendlich erlaubt dieser Ansatz das Aufreißen eines kontinuumsmechanischen Netzes unter Berücksichtigung vorgegebener Scher- und Zugfestigkeiten. In Abb. 9.3 wird das Ergebnis dieses Algorithmus an zwei Beispielen demonstriert.

Da das Material in diesem Ansatz jedoch streng genommen als homogen angesehen wird und keine diskontinuumsmechanische Mikrostruktur als intrinsisches Schwächeflächennetzwerk enthält, gehen Pfaff et al. noch einen Schritt weiter und ermöglichen, eine vordefinierte „Defect Matrix“ in Form von Polylinien, Polygonen oder Vektortexturen zu implementieren. Auf diese Weise nähert sich die zunehmende Netzverfeinerung automatisch der vorgegebenen Korngrenzstruktur an und kann somit die Mikrostruktur bis auf



Images copyright Tobias Pfaff, Rahul Narain, Juan Miguel de Joya, James F. O'Brien.

Abb. 9.3: Übergang zum Diskontinuum in einem Glasrohr unter Kompression (links) und der Kollision mit einer Kugel (rechts) [94].

eine beliebige Feinheit dort berücksichtigen, wo die Spannungen und Verformungen dies notwendig machen.

Wie bereits angedeutet ist der gesamte Ansatz hier nur in seinen prinzipiellen Grundzügen dargestellt und im Detail deutlich komplizierter, weshalb die Überlegungen an dieser Stelle eher theoretischer Natur sind und lediglich ein mögliches Entwicklungspotential für die Zukunft andeuten sollen.

9.2.3 Erweiterte Finite Elemente (XFEM)

Es wurde bereits mehrfach angesprochen, dass die konventionelle Kontinuumsmechanik bezüglich der Beschreibung von Rissbildungs- und Bruchprozessen aufgrund der Unteilbarkeit des Berechnungsnetzes schnell an ihre Grenzen stößt. Die Methode der erweiterten finiten Elemente versucht eben jene Einschränkungen zu eliminieren bzw. zumindest abzumildern, indem die Ansatzfunktionen betroffener Knotenpunkte mit zusätzlichen Freiheitsgraden erweitert werden, wobei diese Erweiterung dabei auf a-priori bekanntem oder erwarteten Verhalten basieren. Um dies zu verstehen, wird nachfolgend zunächst an die Grundzüge kontinuumsmechanischer Codes erinnert, wobei jedoch auf eine mathematisch strenge Herleitung im Hinblick auf das eigentliche Thema dieses Abschnittes verzichtet wird. Der interessierte Leser wird für eine ausführlichere Behandlung auf [42, 98] verwiesen.

Im Rahmen der Berechnung von Spannungs-Verformungsfeldern muss auf einem Raumbereich $\Omega \in R^3$ im Allgemeinen ein Gleichungssystem der Form

$$L(\mathbf{u}) = \mathbf{f} \quad (9.3)$$

gelöst werden. Hierbei ist L ein linearer Differentialoperator, \mathbf{f} ein Vektorfeld - typischerweise der einwirkenden Kräfte - und \mathbf{u} das gesuchte Verschiebungsfeld. Für die numerische Lösung dieses Problems wird der Raumbereich in Gitterpunkte $u_i, i \in [1, N]$ diskretisiert und für die gesuchte Verschiebung \mathbf{u} innerhalb eines Elementes eine Linearkombination aus den Verschiebungen der zum jeweiligen Element gehörigen n_{El} -Stützstellen angesetzt:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_{El}} N_i(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_i \quad (9.4)$$

Die Ansatzfunktionen $N_i(\mathbf{x})$ sind dabei die jeweils zum Knotenpunkt i zugehörigen Interpolationsfunktionen für die Funktionswerte im Inneren des Elementes, deren Basis in der Regel entsprechend der zugrundeliegenden Differenzialgleichung gewählt wird, z.b. stückweise linear oder polynomiell. Für sie gilt die nachfolgend wichtige Eigenschaft $\sum_i N_i = 1$, die sog. „Partition of Unity“. Mittels der somit eingeführten Linearkombination reduziert sich das Problem letztendlich auf die Lösung eines linearen Gleichungssystems für die Unbekannten \mathbf{u}_i .

Allerdings bestimmen bzw. limitieren die Ansatzfunktionen auch die Arten möglicher Lösungen. So entsteht beispielsweise entlang eines Risses eine Diskontinuität im Verformungsfeld sowie eine Spannungsdivergenz an der Rissspitze. Diese Unstetigkeiten innerhalb eines Elementes können mit Standard-Ansatzfunktionen nicht abgebildet werden. Auch aus diesem Grund werden kontinuumsmechanische Berechnungsnetze stets so gewählt, dass Unstetigkeiten von Spannungen oder Verformungen entlang von Elementkanten auftreten, die dann beispielsweise als getrennte Interfaces behandelt werden können. Streng genommen entstammt die adaptive Netzanpassung aus dem vorhergehenden Kapitel eben jenen Überlegungen. Im Gegensatz dazu wird im Rahmen von XFEM der alternative Versuch unternommen, das Netz unangetastet zu lassen, aber stattdessen die Unstetigkeiten durch eine gezielte Erweiterung der Ansatzfunktionen zu beschreiben. Hierfür wird als Grundlage das angesprochene „Partition of Unity“-Theorem genutzt.

Im Zuge der Entwicklung solcher Erweiterungsmethoden wurde eine Vielzahl von Formulierungen abgeleitet [10], die sich beispielsweise im Träger der Anreicherungs-

funktionen (global oder lokal) oder der Implementation der zugehörigen Freiheitsgrade (intrinsisch oder extrinsisch) unterscheiden. Nachfolgend wird daher lediglich die lokale, extrinsische XFEM-Implementation für die zweidimensionale Rissausbreitung vorgestellt.

Das Verschiebungsfeld wird dabei durch eine Erweiterung von Gl. 9.4 beschrieben [99]:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_{El}} N_i(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_i + \sum_{k=1}^m N_k(\mathbf{x}) \cdot \psi(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{a}_k \quad (9.5)$$

Es wird unmittelbar ersichtlich, dass die Anreicherung extrinsisch durch die Addition eines Terms mit der i.A. diskontinuierlichen Anreicherungsfunktion $\psi(\mathbf{x})$ mit den Koeffizienten \mathbf{a}_k geschieht, während eine intrinsische Formulierung direkt die Interpolationsfunktionen $N_i(\mathbf{x})$ modifiziert hätte. Die zugehörige Summation der Anreicherung erstreckt sich dabei nur über diejenigen Knotenpunkte, die sich in der Nähe des Risses bzw. der Risspitze befinden und als „angereichert“ markiert werden, d.h. es wird eine lokale Formulierung verwendet. Eine etwas unangenehme Eigenschaft der Darstellung in Gl. 9.5 besteht darin, dass die Verschiebung $\mathbf{u}(\mathbf{x}_i)$ auf den Knotenpunkten selbst nicht mehr direkt dem zugehörigen \mathbf{u}_i entspricht, d.h. $\mathbf{u}(\mathbf{x}_i) \neq \mathbf{u}_i$. Um dies zu umgehen, wird Gl. 9.5 einer Verschiebung unterzogen:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_{El}} N_i(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_i + \sum_{k=1}^m N_k(\mathbf{x}) \cdot (\psi(\mathbf{x}) - \psi(\mathbf{x}_i)) \cdot \mathbf{a}_k \quad (9.6)$$

An dieser Stelle kann nun ein Satz von Anreicherungsfunktionen entsprechend der Aufgabenstellung implementiert werden. Hierfür ist am Beispiel der Rissausbreitung ebenfalls ein Algorithmus nötig, der sich damit befasst, wo der Riss gerade verläuft und welche Knotenpunkte dann mit welchen Anreicherungsfunktionen erweitert werden. Auch dabei existiert eine große Vielzahl von Vorgehensweisen, die hier nicht umfassend wiedergegeben werden soll. Eine geläufige Methode besteht jedoch darin, diejenigen Knotenpunkte mit einer Heavyside-Funktion $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ zu versehen, durch deren Element ein Riss verläuft, um die Unstetigkeit in der Verschiebung abzubilden. Darüber hinaus werden diejenigen Knotenpunkte, in deren Element die Risspitze gegenwärtig liegt, mit vier sog. „crack tip functions“ erweitert [100, 101]:

$$\mathbf{F}_\alpha(r, \theta) = \left[\sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2}, \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2}, \sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2} \sin \theta, \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2} \sin \theta \right] \quad (9.7)$$

Damit ergibt sich als Gesamtansatz für das Verschiebungsfeld:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_{El}} N_i(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_i + \sum_{k=1}^m N_k(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{a}_k + \sum_{l=1}^h \left[N_l(\mathbf{x}) \cdot \sum_{\alpha=1}^4 \mathbf{F}_{\alpha}(\mathbf{x}) \cdot b_{l\alpha} \right] \quad (9.8)$$

Auch in diesem Abschnitt lässt die verkürzte Darstellung des grundlegenden Berechnungsablaufes die Komplexität der Gesamtmethode möglicherweise unterschätzen. Neben einer durchdachten a-priori Bestimmung geeigneter Ansatzfunktionen und der ständigen Überwachung der Rissgeometrie zur Festlegung von Anreicherungsknoten müssen für die numerische Implementierung noch weitere Besonderheiten betrachtet werden. Wie geht man mit dem Aufeinandertreffen mehrerer Risse um? Kann der gleiche Risse ein Element mehrfach schneiden oder durch die gleiche Elementkante wieder austreten durch die er eintrat? All dies sind Eventualitäten, die zwar keinesfalls unüberwindbare konzeptionelle Hürden darstellen, aber zusätzlich berücksichtigt werden müssen und damit den Implementationsprozess erschweren. Dies erklärt möglicherweise auch, warum sich die XFEM-Methode trotz ihrer hohen Attraktivität bislang noch nicht flächendeckend verbreitet hat und nur vereinzelt in die bekannteren Rechencodes eingegangen ist. Zum gegenwärtigen Zeitpunkt und Kenntnisstand des Autors ist daher zu resumieren, dass XFEM zwar bereits gute Erfolge in der Simulation prinzipieller Rissbildungsmechanismen erzielt hat, aber noch ein hoher Bedarf an weiteren Entwicklungen auf theoretischer und implementativer Seite besteht.

Kapitel 10

Zusammenfassung

Auf mikromechanischer Ebene stellen Salzgesteine ein Diskontinuum aus unregelmäßig geformten Salzkristallen dar, die entlang ihrer Korngrenzen miteinander wechselwirken. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Modellierungsansatz für Salzgesteine basierend auf der diskontinuumsmechanischen Berechnungsmethode unter Verwendung von Voronoi-Triangulationen entwickelt und validiert, wobei die Grundidee darin bestand, dass diese Korngrenzen als intrinsisches Schwächeflächennetzwerk wirken und dabei die hauptsächlichen Träger der Schädigungsentwicklung im Festkörper sind. Neben mechanischen Beanspruchungen können diese auch durch hydraulischen Druck geöffnet werden und somit als potentielle Fließwege für eindringende Fluide agieren.

Aus diesem Grund wurde die diskontinuumsmechanische Berechnungsmethode verwendet, die es erlaubt, einen Körper als Ansammlung deformierbarer und untereinander wechselwirkender Blöcke zu simulieren. Kristallplastizität und Kriecheigenschaften werden dabei mittels eines visko-elasto-plastischen Stoffmodells als intrakristalline Prozesse innerhalb der jeweiligen Kristalle modelliert, während die Schädigungsentwicklung durch die interkristalline Zug- und Scherbeanspruchung der Korngrenzflächen mittels eines speziellen adhäsiven Scherreibungsmodells berücksichtigt wird. Hierfür wurde eine Parametrisierungsstrategie entwickelt, die die Ableitung der interkristallinen Scherparameter auf Grundlage von triaxialen Laborversuchsdaten ermöglicht. Erstmals wurde darüber hinaus ein phänomenologisches Verheilungsmodell entwickelt und implementiert, das den zeitabhängigen Wiederaufbau kohäsiver Kräfte auf Korngrenzen unter Druckbelastung abbildet. Weiterhin wurden unter Zuhilfenahme eines externen Voronoi-Generators Pro-

grammsysteme entwickelt, die zwei- und dreidimensionale Voronoi-Zerlegung beliebiger Körper ermöglichen.

Der vorgestellte Ansatz wurde durch die Nachrechnung zahlreicher experimenteller Versuche bezüglich seiner hydro-mechanischen Plausibilität und Leistungsfähigkeit validiert. Daraufhin wurden praktische Anwendungen untersucht, in denen mit zunehmender Komplexität die Kopplung mechanischer, hydraulischer und thermischer Effekte modelliert wurde.

Kapitel 11

Extended Summary

Overview

Modern assessments of stability and integrity of the various tasks in salt mining are based on two pillars: The experimental investigation of the location-specific rock strength and deformation properties as well as the numerical simulation of the geomechanical behavior based on complex constitutive laws and realistic representations of the project's geometry. Supported by the rapid developments in computer technology, numerical methods have become essential tools for the assessment of problems ranging from conventional mining and cavern storage up to the final disposal of nuclear waste [7].

Within the scope of this work, a discontinuum-mechanical modeling (DEM) approach for salt rocks is proposed, that yields significant advantages over conventional continuum-mechanical modeling and which is in particular able to model additional processes relevant to the integrity and stability of structures in salt rock. Using the framework of DEM, specialized constitutive models for salt rocks and bedding planes developed at the IfG Leipzig [41, 51, 52] are used in order to qualitatively replicate the macroscopic behavior of polycrystalline salt rocks as assemblies of elasto-visco-plastic grains, which are interacting at their grain boundaries according to an adhesive shear model. The explicit modeling of grain boundaries also allows for the pressure-driven percolation of fluids under hydro-mechanical loading of the salt rocks to be modeled. Additionally, an approach for grain boundary healing under compressions is included in the numerical formulation.

The discontinuous nature of salt rocks



Fig. 11.1: Samples of rock salt with clearly visible grain structure.

Salt rocks consist of crystal grains of various geometry and texture (Fig. 11.1). The discontinuities between the grains, i.e. the grain boundaries, represent a fluid-tight intergrown fracture network. The characteristic deformation mechanisms in salt rocks are based on various microscopic interactions, for which several sophisticated macroscopic descriptions have already been developed. In order to understand the entirety of the occurring effects it is however necessary to describe the underlying mechanism of crystall deformation, fracture-initiation and -propagation on the basis of the rock's structure.

In a simplified view, the deformation behavior of salt rocks can be seen as the sum of three different main contributions [20]:

- Ductile crystal slip plasticity (CSP)
- Brittle grain boundary microcracking (GBM)
- Grain boundary sliding (GBS)

These three main effects are coexisting and cooperation mechanisms, so that e.g. macroscopic viscoplastic flow and localized intergranular fracturing are inseparably linked. However, each of the main effects in this simplified division of deformation mechanisms may be constituted by a whole range of different sub-mechanisms with their own temperature- and stress-dependent contributions. For example, the crystal plasticity itself consists of at least five independent mechanisms, which contribute to the overall plastic behavior of the salt crystals [11]. Combined with grain boundary mechanisms and additional effects due to impurities and fluid inclusions the complex microstructure of salt rocks creates a

convoluted cluster of contributions which together make up the macroscopic behavior of the material.

This work is particularly concerned with the effects on grain boundaries as the primary sources of damaging and fluid percolation. The total deformation of polycrystalline materials consists of both intra- and intercrystalline contributions, so that the overall macroscopic behavior crucially depends on which contribution dominates and how these interact. Due to differences in the orientation of the plastic slip planes within a salt grain, dislocations tend to accumulate at the grain boundaries, leading to stress concentrations and subsequent shear movement. Boucier et al. [20] observed this effect based on optical and electron-microscopic imaging of synthetic rock salt specimen under uniaxial compression, thereby confirming the aforementioned notion of grain boundaries as primary accumulation points of damage. Similar findings were made using acoustic emission measurements on rock salt during triaxial compression tests, where the seismic locations showed a clear cellular structure with cell sizes in the order of several grain diameters [29].

In terms of tightness of salt rocks against gases and fluids, the permeability of rock salt is due to the activation of this network by hydraulic pressure or deviatoric stress. The mechanically or hydraulically induced permeability of salt rocks results from the same micro-physical processes: The development of a flow path network along grain boundaries after exceeding a threshold which is determined by the dilatancy boundary for deviatoric load conditions and by the acting normal stresses to compensate cohesive/adhesive grain bonds in the case of fluid pressure load.

The basic notions of discontinuum-mechanical modeling of salt rocks

The distinct-element-method (DEM [48]) extends the capabilities for conventional continuum-mechanical approaches by introducing a new level of discretization, which allows it to describe independent deformable bodies that interact at their contact points and surfaces. The behavior of these contact surfaces can then be modeled by incrementally formulated joint constitutive models of arbitrary complexity (Fig. 11.2). The basic idea of the approach proposed in this thesis was to use the DEM-method by trying to explicitly model the thermo-hydro-mechanical processes resulting from the grain structure of polycrystalline

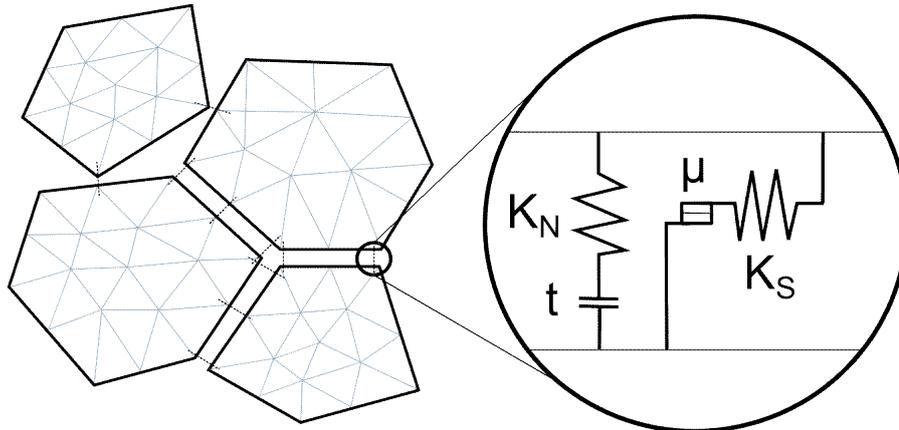


Fig. 11.2: Schematic representation of contact interactions between neighboring deformable & discrete elements.

salt rocks. The model geometry therefore needed to be represented by a randomised assembly of polyhedral grains, in order to simulate the discontinuous and granular nature of salt rocks. A method based on two- and three-dimensional Voronoi-discretizations was developed to represent arbitrary geometries based on such polyhedral Voronoi-structures. The program creates pseudo-random point clouds using a Monte-Carlo-method, which can then be refined to avoid clustering. It is also possible to define location-dependent point distances, so that localized areas with higher or lower point density may be constructed. Using the freely available tool voro++ [57] this point cloud is then converted into a 2D/3D Voronoi-structure. The approach may also be coupled with 3D-CAD-data of the structures to be modeled. Based on simple cubic Voronoi-structures (Fig. 11.3) first simulations were

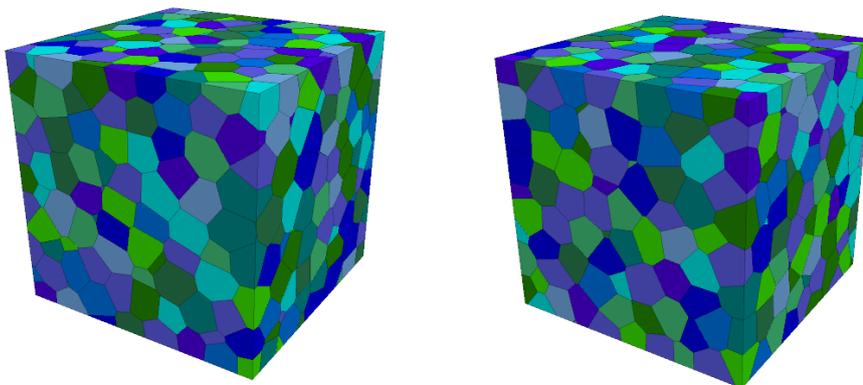


Fig. 11.3: Two different random Voronoi-triangulations of a cube.

carried out in order to investigate the dependencies of their elastic macroscopic properties on the microscopic intra- and intercrystalline behavior. Recommended relationships between normal and shear stiffnesses as well as conditions for numerical stability were derived. Subsequently, compression tests on cylindrical specimen were carried out using standard constitutive models, which yielded comparable results with published data on other published DEM-simulations [68].

Since it would be computationally unfeasible to represent large geological structures with realistic grain sizes of milli- and centimeters, a coarse-grained approach to modeling was aimed at. Therefore, discretization studies were also carried out on the cylindrical specimen and the strength had shown to be largely unaffected by the size of the Voronoi-grains within the range of studied values, as long as the grain size is sufficiently small against the extent of the model geometry. A general tentative rule of at least ten salt grains per relevant dimension (e.g. pillar height) was adopted.

While the brittle failure of rocks using DEM simulations using linear elasto-plastic models is fairly straightforward, this thesis – among other aspects – aimed at extending this methodology into the realm of nonlinear elasto-visco-plasticity in conjunction with the complex shear models developed for salt rocks at the IfG Leipzig. To accomplish this, a parametrization approach for both the intra- and intercrystalline properties had to be devised. For the parametrization, the following assumption was made based on experimental and in-situ experiences: The crystal matrix – and therefore the intra-crystalline properties – dominates the hardening and creep behavior of the material, while the softening occurs predominantly by shear and tensile failure on grain boundaries. The behavior of the grains themselves is therefore assumed to be plastically hardening up to an enveloping maximum strength after which – in contrast to conventional continuum-mechanical modeling of salt rocks – no softening occurs. Softening is then achieved by the increasing shear loading on the salt grains as the matrix hardens up until the point where the grain boundaries fail.

In order to use this approach the strength properties of the grain boundaries in interaction with the corresponding properties of the crystal matrix need to be determined. Experimental shear tests are typically carried out on bedding planes between different types of rock, since these act as weakness planes where shear failure predominantly takes place. Such preferred zones of failure can also be observed on rock salt specimen where transitions between salts of different grain sizes occur. Therefore, such tests are not sufficient to determine the grain boundary properties, which is why a different approach was taken in this thesis

by deriving those shear parameters from experimentally determined strength values and elemental relations from solid mechanics.

Given a series of triaxial tests on salt rock specimen we obtain the effective material strength $\sigma_{1,B}$ as a function of plastic strain ε_p and confining stress σ_3 . Using elemental relations of solid mechanics, this can be used to derive expressions for the maximum shear stress τ_{max} at the corresponding normal stress σ_N [67]:

$$\tau_{max} = \frac{(\sigma_1 - \sigma_3) \cdot \sqrt{\sigma'_1}}{1 + \sigma'_1} \quad (11.1)$$

$$\sigma_N = \frac{\sigma_1 + \sigma_3 \cdot \sigma'_1}{1 + \sigma'_1} \quad (11.2)$$

The nonlinear adhesive shear model for bedding planes and grain boundaries can be adjusted to replicate this behavior, thereby translating the triaxial test results into the appropriate parametrization for the grain boundary behavior.

Another advantage of the discontinuum-mechanical approach lies in its capabilities to model the pressure-driven percolation of gases and fluids on discrete flow paths on opened grain boundaries. The undamaged grain boundaries start out as impermeable, but can be opened due to tensile or shear failure, which in turn allows for an applied fluid pressure to move into these contacts (Fig. 11.4). Within this thesis several numerical modeling tests have been carried out in order to verify the functionality of this mechanism.

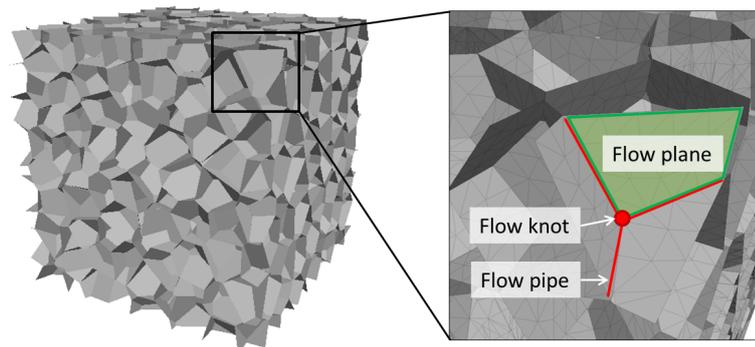


Fig. 11.4: Discontinuum-mechanical grain boundary structure as a potential fluid flow network.

Validation

After devising the necessary tools and concepts necessary for the discontinuum-mechanical modeling and verifying the functionality of the essential hydro-mechanical mechanisms, the approach was then validated using recalculations of different laboratory experiments on rock salt. In both uni- and triaxial compression tests a good agreement of the simulation with experimental data was achieved. The development of damage appears to be firstly initiated by isolated tensile cracks parallel to the direction of loading and upon further deformation these are linked to each by an increasing number of shear fractures within the specimen (Fig. 11.5). With increasing confining stress we observe a transition to a

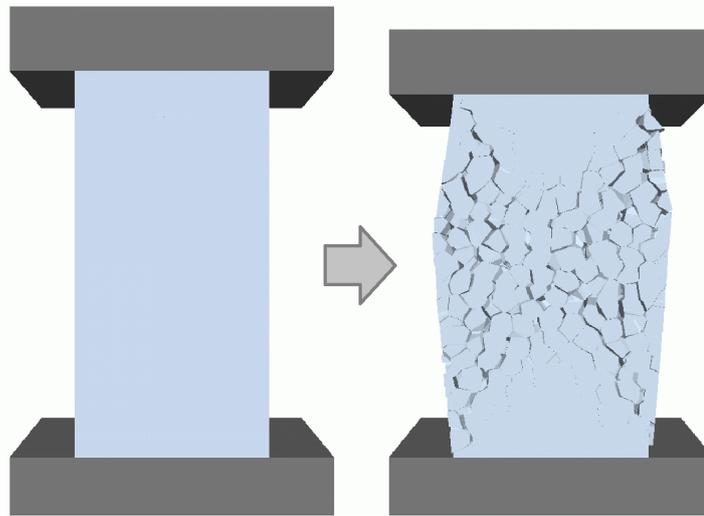


Fig. 11.5: Modeled development of fractures within a sample during a compression test.

much more ductile behavior with decreasing damage in the material. This can also be confirmed by evaluating the dilational volumetric expansion of the specimen, which also yields good agreement with laboratory measurements up until the regime of very large post-peak deformations, where an additional intra-crystalline failure mechanisms would be necessary to describe the final shearing through grains. An extensive discussion is given, describing the potential for further improvement of this method in the future. In general, the simulated macroscopic salt rock strength and dilatancy in dependence of confining stress was both qualitatively and quantitatively in good agreement with experimental observations (Fig. 11.6).



Fig. 11.6: Deformed discontinuum-mechanical model of a rock salt sample after testing (left) in comparison with the real specimen (right).

Further simulations of validation tests on different modes of loading (deformation-controlled vs. stress-controlled) and geometry (shear loading on a rock salt pillar) were carried out, which also corresponded very well with the laboratory measurements.

On the topic of coupled hydro-mechanical behavior, again experimental investigations of the IfG Leipzig were used as a basis for comparative simulations. The numerical modeling in agreement with the laboratory data and additionally showed the capability of the approach to model the stress-field-dependent percolation of gases and fluids in salt rocks.

As an additional innovation, a first discontinuum-mechanical approach for time- and stress-dependent healing of fractures on grain boundaries is proposed and qualitatively tested. The approach allows for the re-establishment of cohesive forces on grain boundaries to model the healing capabilities of salt rocks, which are confirmed by numerous experimental studies and may be relevant for long-term assessments of structural integrity.

Practical application

The approach presented in this thesis was applied to several examples of practical applications from conventional mining over cavern storage to nuclear waste disposal.

In the modeling of a room-and-pillar mine with high subsidence rates the long-term behavior of the pillar structure and overburden was investigated. The simulations achieved good agreement with the real subsidence development and also capture an increase in subsidence rates, which was observed in-situ. Over long times the spalling of the pillars

leads to a self-backfilling effect when the mined rooms converge and eventually fully close the underground openings (Fig. 11.7).

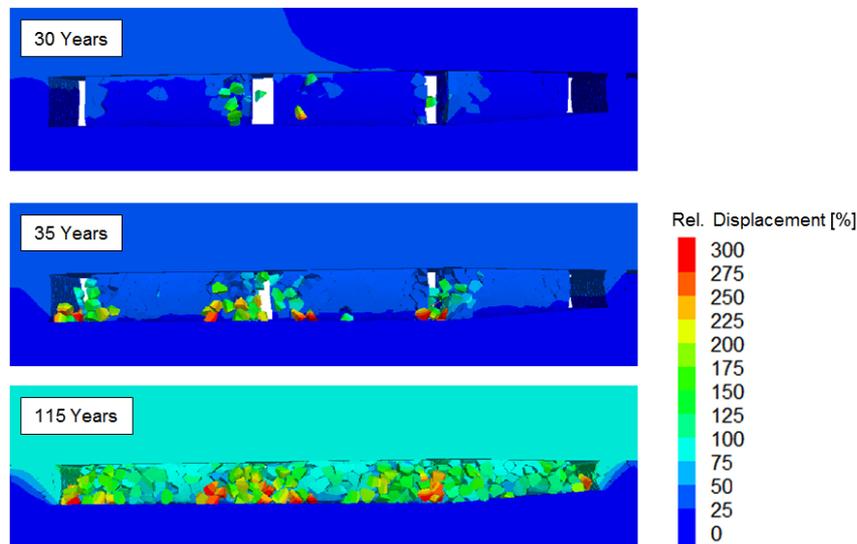


Fig. 11.7: Modeling of pillar spalling and eventual self-backfilling in room-and-pillar mining.

The approach has been used in simulations on cavern cross-sections, where the interaction of the gas/fluid at the cavern contour was of interest. The hydro-mechanical modeling showed that a limited contour-region is subjected to percolation due to the applied pressure cycles. This effect becomes stronger when the rate of pressure build-up increases or when the cavern was surrounded by a far-reaching relaxation zone, e.g. after being kept at minimal pressure for an extended period of time (Fig. 11.8).

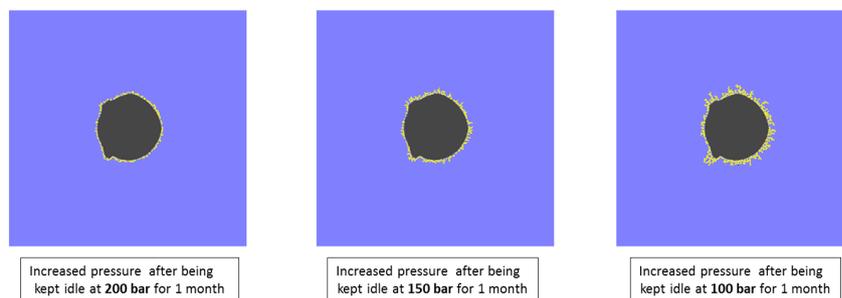


Fig. 11.8: Modeling of contour percolation during pressure increase in a cavern after being kept at a low pressure.

After applying the proposed method in both a mechanical and hydro-mechanical context, the final application example was the disposal of heat-generating nuclear waste in

a flat-bedded salt structure and therefore captures the last step to a fully-coupled thermo-hydro-mechanical simulation. Using emplacement concepts proposed with the preliminary safety assessment for a waste-disposal site in the salt dome Gorleben for a different generic flat-bedded salt structure, the aim was to assess the integrity of the geological barrier upon the thermally induced loading due to the waste canisters. The simulation results show a spatially and temporally limited area at the top of the salt, where the minimum principal stress criterion is violated and where the coupled modeling predicts a pressure-driven percolation into the salt barrier (Fig. 11.9). However, this violation only occurs for a limited amount of time and even at the point of strongest violation leaves a distance of over 300 m of undisturbed rock salt barrier to the emplacement horizon. Thereby the favorable sealing capacity of such a multi-barrier system may be indicated by these generic investigations.

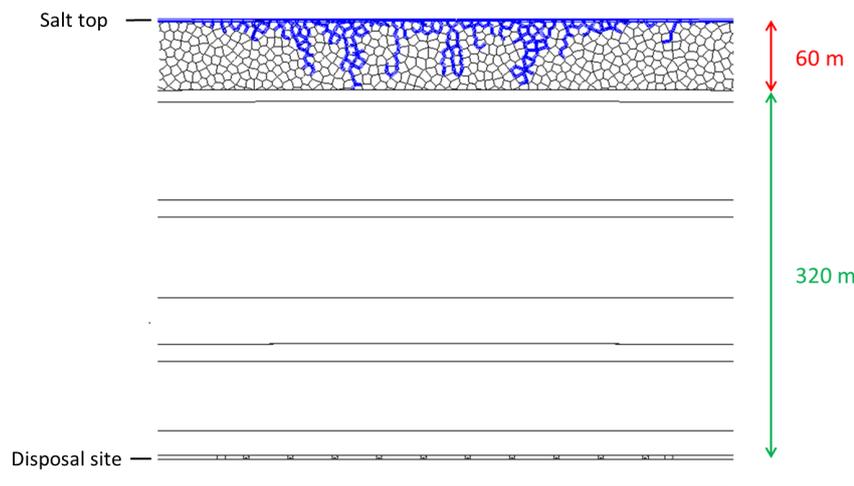


Fig. 11.9: Limited percolation of groundwater into the hydraulic barrier after emplacement of heat-generating waste.

Summary

Within this these a modeling and parametrization approach for salt rocks based on discontinuum-mechanical simulation of Voronoi-triangulated objects was developed, verified and validated. The basis notion lies in the grain boundaries of salt rocks acting as an intrinsic network of weakness planes and therefore being the primary source for the evolution of structural damage in the material. In addition to mechanical loading these grain boundaries may also

be opened by an acting hydraulic pressure, which makes them act as potential flow paths for gases and fluids.

Based on these ideas, the discontinuum-mechanical approach was used, which allows for the description of models as an assembly of deformable blocks that interact with each other over contact laws. Crystal plasticity and creep are described as intracrystalline processes, while the accumulation of damage is modeled via tensile or shear failure of the grain boundaries. A parametrization approach based on triaxial test results was derived in order to determine appropriate shear parameters for the intercrystalline interactions. With the aid of external Voronoi-generation tools, several programs were developed in order to model arbitrary geometries as Voronoi-structures.

The proposed approach was then validated by recalculation of numerous experimental investigations with respect to the hydro-mechanical properties and simulation capabilities. Several practical examples with increasing complexity were then carried out in order to investigate coupled thermo-hydro-mechanical effects in salt rocks.

Symbolverzeichnis

Physikalische & mechanische Grundgrößen

δ_{ij} Kronecker-Symbol

ε_{ij} Deformationstensor

η Porosität

γ Spezifisches Gewicht

λ Wärmeleitfähigkeit

$\mu_{\text{Fluid/Gas}}$ Dynamische Viskosität des Fluids/Gases

ρ Dichte

σ_N Normalspannung

σ_R Radialspannung

σ_V Von-Mises Vergleichsspannung

σ_ϕ Tangentialspannung

σ_{eff} Effektivspannung

σ_{ij} Spannungstensor

τ Scherspannung

Θ_{ij} Rotationstensor

\vec{F} Kraftvektor

\vec{Q}	Volumenstromvektor
\vec{u}	Verschiebungsvektor
\vec{x}	Ortsvektor
c_S	Spezifische Wärmekapazität von Steinsalz
D_G	Teufendruckgradient
f	Frequenz
g	Erdbeschleunigung
$H(t)$	Heaviside-Funktion
k	Permeabilität
m	Masse
M_L	Lokale Ereignismagnitude
p	Druck
T	Temperatur
t	Zeit
V	Volumen
$v_{p/s}$	Schallgeschwindigkeit der p- bzw. s-Welle
w	Spaltöffnungsweite

Stoffmodellparameter

$\Delta\mu$	Haftreibungsterm
ε_P	Plastische Verformung
ε_{Vol}	Volumetrische Verformung
η^M	Maxwell-Viskosität
μ	Reibungskoeffizient

μ_K	Gleitreibungskoeffizient
ν	Poissonzahl
Φ_R	Restreibungswinkel
σ_K	Kontaktfestigkeit
σ_T	Zugfestigkeit
σ_Φ	Krümmung der Festigkeitskurve
σ_D	Einaxiale Druckfestigkeit
σ_{MAX}	Maximale effektive Festigkeit
τ_H	Verheilungszeit
c	Kohäsion
E	Elastizitätsmodul
f_{vel}	Geschwindigkeitsfaktor
G	Schermodul
i_0	Aufgleitwinkel
K	Kompressionsmodul
K_N	Normalsteifigkeit
K_S	Schersteifigkeit
$K_{1/2}$	Krümmungsparameter 1/2 der Scherfestigkeitskurve
$L_{1/2}$	Entfestigungsdistanzen 1/2 der Scherfestigkeit
v_k	Kritische Scherverschiebungsgeschwindigkeit

Weitere Symbole

ψ	Anreicherungsfunktion
F_α	'crack-tip'-Funktion

M Messtensor zur Netzdaption

$N_i(\vec{x})$ Ansatzfunktion für den Knotenpunkt i am Ort \vec{x}

$l_{V/Z}$ Mittlere Kantenlänge der Voronoi-Blöcke (V) bzw. ihrer internen Zonen (Z)

$P(t)$ Wärmeleistung

$P_i(\vec{x})$ Einsetzwahrscheinlichkeit des i -ten Teilchens an Ort \vec{x}

$R(t)$ Wirkfaktor

$t_{1/2}$ Halbwertszeit

U_{global} Globale Energiefunktion für den Einsetzungsalgorithmus

U_{ij} Wechselwirkungsenergie zwischen dem i -ten und j -ten Teilchen

Literaturverzeichnis

- [1] EMONS, H. H.: Die Kaliindustrie - Geschichte eines deutschen Wirtschaftszweiges. In: *Vortrag im Plenum der Leibniz-Sozietät*, 2001
- [2] PINZKE, Dr. G.: *Hundert Jahre Stassfurter Salzbergbau*. Staßfurt : Anhang zu der anlässlich der Hundertjahrfeier vom Kaliwerk Staßfurt am Tage des Bergmannes 1952 herausgegebenen Festschrift, 1952. – Bild zur freien Verteilung lizenziert durch Creative Commons CC BY-SA 2.5
- [3] RAUCHE, H.: *Die Kaliindustrie im 21. Jahrhundert*. Springer Vieweg, 2015
- [4] THORNS, R. L. ; GEHLE, R. M.: A Brief History of Salt Cavern Use. In: *Salt 8 SMRI Symposia Collection* (2000)
- [5] MISSAL, C. ; STAHLMANN, J. ; ROEHNERT, M. ; HAHN, P.: Underground Infrastructure Rooms in Squeezing Rock – Geotechnical Conditions in the Konrad Mine during the Conversion to a Repository for Radioactive Waste. In: PYRAK-NOLTE, L. J. (Hrsg.) ; CHAN, A. (Hrsg.) ; DERSHOWITZ, W. (Hrsg.) ; MORRIS, J. (Hrsg.) ; J., Rostami (Hrsg.): *Proceedings of the 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*. San Francisco, California, USA, Juni 2014. – ISBN: 978-0-9894844-0-4
- [6] RECHARD, R. P.: Historical background on performance assessment for the Waste Isolation Pilot Plant. In: *Reliability Engineering & System Safety* 69 (2000), S. 5–46
- [7] MINKLEY, W. ; MÜHLBAUER, J. ; LÜDELING, C.: Dimensioning principles in potash and salt mining to achieve stability and integrity. In: *Rock Mechanics and Rock Engineering*. Springer Verlag Wien, 2016
- [8] LIU, G. R. ; QUEK, S. S.: *The finite element method*. Elsevier Science, 2003
- [9] CUNDALL, P. A.: Explicit Finite Difference Method in Geomechanics. In: *Numerical Methods in Engineering (Proceedings of the EF Conference on Numerical Methods in Geomechanics)* Bd. 1. Blacksburg, Virginia, 1976, S. 132–150
- [10] FRIES, T.-P. ; BELYTSCHKO, T.: The extended/generalized finite element method: An overview of the method and its applications. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 00 (2000), S. 1–6
- [11] HANSEN, F.D.: Micromechanics of Isochoric Salt Deformation. In: LABUZ, Joseph F. (Hrsg.) ; DETOURNAY, Emmanuel (Hrsg.) ; PETTITT, Will (Hrsg.) ; PETERSEN, Lee (Hrsg.) ; STERLING, Ray (Hrsg.): *Proceedings of the 48th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*. Minneapolis, Minnesota, USA, Juni 2014. – ISBN: 978-0-9894844-1-1

- [12] MINKLEY, W.: Sprödbbruchverhalten von Carnallit und seine Auswirkungen auf die Langzeitsicherheit von Untertagedeponien. In: *Berichte FZKA-PTE Nr. 5*. Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1997, S. 249–275
- [13] MINKLEY, W.: *Gebirgsmechanische Beschreibung von Entfestigung und Sprödbrecherscheinungen in Carnallit*, TU Bergakademie Freiberg, Habilitation, 2004
- [14] CARTER, N. L. ; HANSEN, F.: Creep of rocksalt. In: *Tectonophysics* 92 (1983), März, Nr. 4, S. 275–333
- [15] ERIKSSON, L. G. ; MICHALSKI, A.: Hydrostatic conditions in salt domes - a reality or a modeling simplification. In: *Proc. Int. Symposium on Rock Stress and Rock Stress Measurements*, 1986, S. 121–132. – Stockholm
- [16] HUNSCHKE, U. ; SCHULZE, O. ; WALTER, F. ; PLISCHKE, I.: Projekt Gorleben - Thermomechanisches Verhalten von Salzgestein / Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover. 2003 (9G2138110000). – Abschlussbericht
- [17] MINKLEY, W. ; LÜDELING, C.: Deep Borehole Disposal in Salt Rocks. In: *Proceedings of the 50th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*. Houston, Texas, Juni 2016
- [18] URAI, J. L. ; SPIERS, C. J.: The effect of grain boundary water on deformation mechanisms and rheology of rocksalt during long-term deformation. In: WALLNER, M. (Hrsg.) ; LUX, K. H. (Hrsg.) ; MINKLEY, W. (Hrsg.) ; R., Hardy H. (Hrsg.): *The Mechanical Behavior of Salt—Understanding of THMC Processes in Salt: Proceedings of the 6th Conference (SaltMech6)*. Hannover : CRC, 22–25 May 2007
- [19] BÉREST, P. ; BÉRAUD, J. F. ; GHARBI, H.: A very slow creep test on an Avery Island salt sample. In: *Proceedings of the 48th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*, 2014
- [20] BOURCIER, M. ; DIMANOV, A. ; HÉRIPÉ, E. ; RAPHANEL, J.L. ; BORNERT, M. ; DESBOIS, G.: Full field investigation of salt deformation at room temperature: Cooperation of crystal plasticity and grain sliding. In: BÉREST, P. (Hrsg.) ; GHOREYCHI, M. (Hrsg.) ; HADJ-HASSEN, F. (Hrsg.) ; TIJANI, M. (Hrsg.): *Proceedings of the 7th Conference on the Mechanical Behavior of Salt*. Paris, France : CRC Press, April 2012, S. 37–42
- [21] DESBOIS, G. ; URAI, J.L. ; SCHMATZ, J.: The distribution of fluids in natural rock salt to understand deformation mechanisms. In: BÉREST, P. (Hrsg.) ; GHOREYCHI, M. (Hrsg.) ; HADJ-HASSEN, F. (Hrsg.) ; TIJANI, M. (Hrsg.): *Proceedings of the 7th Conference on the Mechanical Behavior of Salt*. Paris, France : CRC Press, April 2012, S. 3–12
- [22] DAVIDGE, R. W.: *Mechanical Behaviour of Ceramics*. 1. Cambridge University Press, 1979
- [23] CORRENS, Carl W.: *Introduction to mineralogy, crystallography and petrology*. Springer Verlag Heidelberg, 1969
- [24] LUBLINER, J.: *Plasticity Theory*. Dover Publications, 2008. – ISBN: 978-0486462905

- [25] SCHMID, E. ; BOAS, W.: Kristallplastizität mit besonderer Berücksichtigung der Metalle. In: SCHMID, E. (Hrsg.) ; BOAS, W. (Hrsg.): *Struktur und Eigenschaften der Materie in Einzeldarstellungen*. Berlin : Verlag von Julius Springer, 1935
- [26] CALLISTER, W. D. ; RETHWISCH, D. G.: *Materials Science and Engineering: An Introduction*. 8th. Wiley, 2010. – ISBN 978-0470556733
- [27] TER HEEGE, J. H. ; DE BRESSER, J. H. P. ; SPIERS, C. J.: Rheological behavior of synthetic rocksalt: the interplay between water, dynamic recrystallization and deformation mechanisms. In: *Journal of Structural Geology* 27 (2005), S. 948–963
- [28] STOKES, R. J. ; LI, C. H.: Dislocations and the Strength of Polycrystalline Ceramics. In: *Materials Science Research*. Springer Science+Business Media New York, 1963
- [29] MANTHEI, G.: Characterization of Acoustic Emission Sources in a Rock Salt Specimen under Triaxial Compression. In: *Bulletin of the Seismological Society of America* 95 (2005), Nr. 5, S. 1674–1700. <http://dx.doi.org/10.1785/0120040076>. – DOI 10.1785/0120040076
- [30] PEACH, C.J. ; SPIERS, C. J.: Influence of crystal plastic deformation on dilatancy and permeability development in synthetic salt rock. In: *Tectonophysics* 256 (1996), S. 101–128
- [31] MINKLEY, W. ; KNAUTH, M. ; WÜSTE, U.: Integrity of salinar barriers under consideration of discontinuum-mechanical aspects. In: *Mechanical Behavior of Salt VII*. Paris, France : Taylor and Francis Group, April 2012, S. 469–478. – ISBN 978-0-415-62122-9
- [32] MINKLEY, W. ; KNAUTH, M. ; BRÜCKNER, D. ; LÜDELING, C.: Integrity of saliferous barriers for heat-generating radioactive waste - natural analogues and geomechanical requirements. In: *Mechanical Behavior of Salt VIII*. Rapid City, USA, Mai 2015, S. 159–170
- [33] KUKLA, P. A. ; REUNING, L. ; BECKER, S. ; SCHOENHERR, J. ; URAI, J. L.: Distribution and mechanisms of overpressure generation and deflation in the late Neoproterozoic to early Cambrian South Oman Salt Basin. In: *Geofluids* (2011)
- [34] BRACKE, G. ; POPP, T. ; PÜTTMANN, W. ; KIENZLER, B. ; LOMMERZHEIM, A. ; MOOG, H.: *Berücksichtigung der Kohlenwasserstoff-Vorkommen im Hauptsalz des Salzstockes Gorleben*. GRS-285, 2012
- [35] ALKAN, H.: Percolation model for dilatancy-induced permeability of the excavation damaged zone in rock salt. In: *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 46 (2009), S. 716–724
- [36] BRODSKY, N. S.: Crack Closure and Healing Studies in WIPP Salt Using CoCompression Wave Velocity and Attenuation Measurements: Test Methods and Results / RESPEC. 1990. – Forschungsbericht
- [37] EBERTH, Sascha: *Modellansätze zum Verheilungsverhalten von Steinsalz und ihre Anwendung auf Querschnittsabdichtungen im Salinargebirge*, TU Clausthal, Diss., 2007

- [38] POPP, T. ; KERN, H.: Monitoring the State of Microfracturing in Rock Salt During Deformation by Combined Measurements of Permeability and P- and S- Wave Velocities. In: *Phys. Chem. Earth* 25 (2000), Nr. 2, S. 149–154
- [39] CHEN, J. ; REN, S. ; YANG, C. ; JIANG, D. ; LI, L.: Self-Healing Characteristics of Damaged Rock Salt under Different Healing Conditions. In: *Materials* (2013)
- [40] FUENKAJORN, K. ; PHUEAKPHUM, D. ; JANDAKAEW, M.: Healing of Rock Salt Fractures. In: *Proceedings of the 38th Engineering Geology & Geotechnical Engineering Symposium, 2003*
- [41] MINKLEY, W. ; MÜHLBAUER, J.: Constitutive models to describe the mechanical behavior of salt rocks and the im-bedded weakness planes. In: WALLNER, M. (Hrsg.) ; LUX, K. H. (Hrsg.) ; MINKLEY, W. (Hrsg.) ; R., Hardy H. (Hrsg.): *Proceedings of the 6th Conference on the Mechanical Behavior of Salt*. Hannover, Germany : Taylor and Francis, Mai 2007, S. 119–127. – ISBN: 9780415443982
- [42] ZIENKIEWICZ, O. C. ; TAYLOR, R. L. ; ZHU, J. Z.: *The Finite Element Method - Its Basis and Fundamentals*. Sixth. Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. – ISBN: 0750663200
- [43] ITASCA CONSULTING GROUP INC. (Hrsg.): *3DEC (Three-Dimensional Distinct Element Code) User's Guide*. Minneapolis, Minnesota. USA: Itasca Consulting Group Inc., 2013
- [44] ITASCA CONSULTING GROUP INC. (Hrsg.): *FLAC (Fast Lagrangian Analysis Code) User's Guide*. Minneapolis, Minnesota. USA: Itasca Consulting Group Inc., 2013
- [45] BARGTEIL, A. W. ; WOJTAN, C. ; K., Hodgins J. ; TURK, G.: A Finite Element Method for Animating Large Viscoplastic Flow. In: *SIGGRAPH 2007 Computer Graphics Proceedings, 2007*
- [46] NARAIN, R. ; PFAFF, T. ; F., O'Brien J.: Folding and Crumpling Adaptive Sheets. In: *ACM Transactions on Graphics* 32 (2013), Nr. 4
- [47] IRVING, G. ; TERAN, J. ; FEDKIW, R.: Invertible Finite Elements For Robust Simulation of Large Deformation. In: BOULIC, R. (Hrsg.) ; PAI, D. K. (Hrsg.): *Eurographics/ACM SIGGRAPH Symposium on Computer Animation, 2004*
- [48] CUNDALL, P. A. ; HART, R. D.: Numerical Modelling of Discontinua. In: *Engineering Computations* 9 (1992), Nr. 2, S. 101–113
- [49] HERBST, M. ; KONIETZKY, H. ; WALTER, K.: 3D Microstructural Modeling. In: *Proc. of the 1st International FLAC/DEM Symposium on Numerical Modeling, 2008*
- [50] ITASCA CONSULTING GROUP INC. (Hrsg.): *UDEC (Universal Distinct Element Code) User's Guide*. Minneapolis, Minnesota. USA: Itasca Consulting Group Inc., 2013
- [51] MINKLEY, W.: *Untersuchungen zur Reibung an Gesteinstrennflächen und Modelle zum Gebirgsschlagmechanismus bei Haftreibungsverlust*, TU Bergakademie Freiberg, Diss., 1989

- [52] MINKLEY, W.: Zum Verhalten von Diskontinuitäten im Salzgebirge. In: *33. Geomechanik Kolloquium* Bd. 4. IFGT Freiberg, 2004, S. 113–126
- [53] OKABE, A. ; BOOTS, B. ; SUGIHARA, K. ; CHIU, S. N.: *Spatial Tessellations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams, 2nd Edition*. Wiley, 2000. – ISBN: 978-0-471-98635-5
- [54] DU, Q. ; FABER, V. ; GUNZBURGER, M.: Centroidal Voronoi Tessellations: Applications and Algorithms. In: *SIAM Review* 41 (1999), Nr. 4, S. 637–676
- [55] METROPOLIS, N. ; ROSENBLUTH, A. ; ROSENBLUTH, M. ; TELLER, A. ; TELLER, E.: Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. In: *Journal of Chemical Physics* 21 (1953), S. 1087–1092
- [56] FRENKEL, D. ; SMIT, B.: *Understanding Molecular Simulation*. San Diego: Academic Press, 2002
- [57] RYCROFT, Chris H.: Voro++: A three-dimensional Voronoi cell library in C++. In: *Chaos* 19 (2009)
- [58] McNeel & Associates: *Rhinoceros 5 for Windows*. [Software]
- [59] CHAPPEL, B.A.: Component Characteristics of Jointed Rock Masses. In: *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr.* 12 (1975), S. 87–92
- [60] FOSSUM, A. F.: Effective Elastic Properties for a Randomly Jointed Rock Mass. In: *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr.* 22 (1985), Nr. 6, S. 467–470
- [61] MIN, K. B. ; JING, L.: Numerical determination of the equivalent elastic compliance tensor for fractured rock masses using the distinct element method. In: *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* 40 (2003), S. 795–816
- [62] WU, F.: A 3D model of a jointed rock mass and its deformation properties. In: *International Journal of Mining and Geological Engineering* 6 (1988), S. 169–176
- [63] POPP, T. ; KERN, H. ; SCHULZE, O.: Evolution of dilatancy and permeability in rock salt during hydrostatic compaction and triaxial deformation. In: *Journal of Geophysical Research* (2001)
- [64] EBERHARDT, E.: *Brittle Rock Fracture and Progressive Damage in Uniaxial Compression*, University of Saskatchewan, Diss., April 1990
- [65] SINGH, M. ; SINGH, P.P. ; GUPTA, B.R.K. ; KUMAR, M.: Temperature and pressure dependence of elastic constants. In: *High Temperatures - High Pressures* 33 (2001), S. 199–206
- [66] MATSUI, M. ; HIGO, Y. ; OKAMOTO, Y. ; IRIFUNE, T. ; FUNAKOSHI, K.: Simultaneous sound velocity and density measurements of NaCl at high temperatures and pressure: Application as a primary pressure standard. In: *American Mineralogist* 97 (2012), S. 1670–1675
- [67] NADAI, A.: *Theory of flow and fracture of Solids*. McGraw Hill, 1950
- [68] BOLLINGERFEHR, W. ; BORSTEL, L. E. ; ENGELHARDT, H.-J. ; MÜLLER, C. ; SCHMIDT, H.: *Vergütung der Auflockerungszone im Salinar*. DBE Technology GmbH : Abschlussbericht, 2011. – FKZ 02 E 10649

- [69] FRÜHWIRT, T. ; FAN, L. ; PLÖSSER, A. ; KONIETZKY, H.: Risserzeugung durch Quellzement - Laborversuche und numerische Simulation. In: *44. Geomechanik-Kolloquium*. Leipzig, November 2015
- [70] ASTM STANDARDS: *Standard Test Method for Plane-Strain Fracture Toughness of Metallic Materials (ASTM E399-90)*. Philadelphia: ASTM Standards, 1997. – ASTM E399-90
- [71] LI, Fan: *Discrete Element based numerical simulation of crack formation in brittle material by swelling cement.*, TU Bergakademie Freiberg, Diss., 2017
- [72] SARKAR, S. ; TOKSOZ, M. N. ; BURNS, D.R.: Fluid Flow Modeling in Fractures. In: *Consortium Report, MIT Earth Resources Laboratory Industry Consortium Meeting*, 2004
- [73] WITHERSPOON, P. A. ; WANG, J. S. Y. ; IWAI, K. ; GALE, J. E.: Validity of cubic law for fluid flow in a deformable rock fracture. In: *Water Resources Research* (1979)
- [74] MÜLLER, C. ; LERCH, C. ; OTPARLIK, K. ; KONIETZKY, H.: Simulation of the mechanical deterioration of rock salt at a grain scale. In: BÉREST, P. (Hrsg.) ; GHOREYCHI, M. (Hrsg.) ; HADJ-HASSEN, F. (Hrsg.) ; TIJANI, M. (Hrsg.): *Proceedings of the 7th Conference on the Mechanical Behavior of Salt*. Paris, France : CRC Press, April 2012, S. 107–114
- [75] MUTSCHLER, T.: *Neufassung der Empfehlung Nr. 1 des Arbeitskreises "Versuchstechnik Fels., der Deutschen Gesellschaft für Geotechnik e.V.: Einaxiale Druckversuche an zylindrischen Gesteinsprüfkörpern"*
- [76] BEWICK, R. P.: *Shear Rupture of Massive Brittle Rock under Constant Normal Stress and Stiffness Boundary Conditions*, University of Toronto, Diss., 2013
- [77] LÜDELING, C. ; GÜNTHER, R.M. ; KNAUTH, M. ; MINKLEY, W.: Healing of Rock Salt Damage and Applications. In: *Proceedings of the 49th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*. San Francisco, USA, Juni 2015
- [78] MINKLEY, W.: Festigkeitsverhalten von Sedimentgesteinen im post-failure-Bereich und Gebirgsschlagerscheinungen. In: *Proc. Int. Symp. Rock at Great Depth* Bd. 1, 1989, S. 59–65
- [79] MINKLEY, W. ; GROSS, U.: Zum Haftreibungsverhalten an Gesteinstrennflächen in Abhängigkeit von der Belastungsgeschichte. In: *Felsbau* 6 (1988), Nr. 4, S. 184–188
- [80] MINKLEY, W. ; KNAUTH, M. ; BRÜCKNER, D.: Discontinuum-mechanical behaviour of salt rocks and the practical relevance for the integrity of salinar barriers. In: LABUZ, Joseph F. (Hrsg.) ; DETOURNAY, Emmanuel (Hrsg.) ; PETTITT, Will (Hrsg.) ; PETERSEN, Lee (Hrsg.) ; STERLING, Ray (Hrsg.): *Proceedings of the 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*. Minneapolis, Minnesota, USA, Juni 2013. – ISBN: 978-0-9894844-1-1
- [81] KAMLOT, W.-P.: *Gebirgsmechanische Bewertung der geologischen Barrierefunktion des Hauptanhydrits in einem Salzbergwerk*, Technische Universität Bergakademie Freiberg, Habilitation, 2009

- [82] HEUSERMANN, S. ; EICKEMEIER, R. ; SPRADO, K.-H. ; HOPPE, F.-J.: Initial rock stress in the Gorleben salt dome measured during shaft sinking. In: *Proc. Int. Symposium on Geotechnical Measurements and Modelling*. Karlsruhe, September 2003, S. 193–153
- [83] MINKLEY, W. ; WÜSTE, U.: Nichtlineare Festigkeitskriterien für Gesteine und Gesteinstrennflächen. In: *Neue Bergbautechnik* Bd. 9. 1979, S. 310–314
- [84] SCHOBER, F. ; SROKA, A.: Die Berechnung der maximalen Bodenbewegungen über kavernenartigen Hohlräumen unter Berücksichtigung der Hohlraumgeometrie. In: *Kali und Steinsalz*. K+S GmbH, 1982
- [85] DJIZANNE, H. ; BÉREST, Pierre: Tensile Effective Stresses in Hydrocarbon Storage Caverns. In: *SMRI Fall 2012 Technical Conference* Solution Mining Research Institute, 2012
- [86] BRASSER, T. ; DROSTE, J. ; MÜLLER-LYDA, I. ; NELES, J. ; SAILER, M. ; SCHMIDT, G. ; STEINHOFF, M.: Endlagerung radioaktiver Abfälle in Deutschland / Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS). 2008 (GRS-247). – Forschungsbericht. – ISBN 978-3-939355-22-9
- [87] BUNDESMINISTERIUM FÜR UMWELT, NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT (Hrsg.): *Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Stoffe*. Berlin: Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, September 2010
- [88] REINHOLD, K. ; HAMMER, J. ; PUSCH, M.: Verbreitung, Zusammensetzung und geologische Lagerungsverhältnisse flach lagernder Steinsalzfolgen in Deutschland / Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe. 2014. – Forschungsbericht
- [89] BOLLINGERFEHR, W. ; FILBERT, W. ; DÖRR, S. ; HEROLD, P. ; LERCH, C. ; BURGWINKEL, P. ; CHARLIER, F. ; THOMASKE, B. ; BRACKE, G. ; KILGER, R.: Endlagerauslegung und -optimierung. Bericht zum Arbeitspaket 6. Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. / GRS-281. 2012. – Forschungsbericht
- [90] KOCK, I. ; EICKEMEIER, R. ; FRIELING, G. ; HEUSERMANN, S. ; KNAUTH, M. ; MINKLEY, W. ; NAVARRO, M. ; NIPP, H.-K. ; VOGEL, P.: Integritätsanalyse der geologischen Barriere. Bericht zum Arbeitspaket 9.1. Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. / GRS-286. 2012. – Forschungsbericht
- [91] KRÖHN, K.-P. ; STÜHRENBERG, D. ; HERKLOTZ, M. ; HEEMANN, U. ; LERCH, C. ; XIE, M.: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrusversatz / GRS-254, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), DBE TECHNOLOGY GmbH, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Braunschweig. 2009. – Forschungsbericht
- [92] STÜHRENBERG, D.: Compaction and Permeability Behaviour of Crushed Salt and Mixtures of Crushed Salt and Bentonite. In: *DisTec2004 International Conference on Radioactive Waste Disposal*. Berlin, 2004, S. 511–515
- [93] BIRCH, F. ; CLARK, H.: The thermal conductivity of rocks and its dependence upon temperature and composition. In: *Am. J. Sci.* 238 (1940), S. 529–558

- [94] PFAFF, T. ; NARAIN, R. ; JOYA, J. M. ; O'BRIEN: Adaptive Tearing and Cracking of Thin Sheets. In: *ACM Transactions on Graphics* 33 (2014), Nr. 4
- [95] MUNJIZA, A.: *The Combined Finite-Discrete Element Method*. John Wiley & Sons, Ltd, 2004. – ISBN: 978-0-470-84199-0
- [96] PIOVANO, G.: *Combined finite-discrete element modelling of key instabilities which characterise deep-seated landslides from massive rock slope failure*. Turin, Politecnico di Torino, Diss., 2012
- [97] NARAIN, R. ; SAMII, A. ; O'BRIEN, J.: Adaptive Anisotropic Remeshing for Cloth Simulation. In: *ACM Transactions on Graphics* 31 (2012), Nr. 6
- [98] REDDY, J. N.: *An Introduction to the Finite Element Method*. 2nd. McGraw Hill, 1993
- [99] MOHAMMADI, S.: *Extended Finite Element Method for Fracture Analysis of Structures*. Blackwell Publishing, 2008
- [100] GINER, E. ; SUKUMAR, N. ; TARANCON, J. E. ; FUENMAYOR, F. J.: An Abaqus implementation of the extended finite element method. In: *Engineering Fracture Mechanics* (2008)
- [101] SUKUMAR, N. ; PRÉVOST, J.-H.: Modeling quasi-static crack growth with the extended finite element method. Part 1: Computer implementation. In: *International Journal of Solids and Structures* 40 (2003), S. 7513–7537

Abbildungsverzeichnis

1.1	Eröffnung des Staßfurter Salzbergbaus im Jahre 1852. [2]	1
1.2	Notwendigkeit eines Kompromisses zwischen wirtschaftlicher Optimierung und gleichzeitiger Gewährleistung von Sicherheitsstandards.	2
2.1	Steinsalzproben mit deutlich erkennbarer Mikrostruktur.	5
2.2	Charakteristisches Spannungs-Verformungs-Diagramm für Steinsalz im einachsialen Druckversuch.	6
2.3	Charakteristische triaxiale Druckversuche an Steinsalzproben.	7
2.4	Die drei Phasen des Kriechprozesses.	8
2.5	Laborversuch zur kriechinduzierten Schließung eines Bohrloches	9
2.6	Einfache Beispiele für Defekte in Gitterstrukturen.	12
2.7	Plastische Scherverschiebung durch Bewegung einer Stufenversetzung.	12
2.8	Blockierung der Versetzungsausbreitung an den Korngrenzen unterschiedlich orientierter Kristalle.	14
2.9	Mögliche Rissentwicklung durch Versetzungsakkumulation an einer Korngrenze. (a) intra- und (b) interkristallin [28].	15
2.10	Projektionen der AE-Ereignislokationen in einer Steinsalzprobe bei triaxialer Belastung.	16
2.11	Lichtmikroskopische Aufnahme einer geschädigten Steinsalzprobe im Vertikal- und Horizontalschnitt	17
2.12	CO ₂ -Gletscher nach einem Gasausbruch und druckgetriebenes Verpressen von Öl am Beispiel des Süd-Oman Salzbeckens.	18
2.13	Verteilung von Tracer-Flüssigkeiten entlang der Korngrenzen des Steinsalzes.	19
3.1	Exemplarische Zerlegung des Raumes Ω in Dreieckselemente durch untereinander verbundene Knotenpunkte.	22

3.2	Zugeordnete Fläche und Integrationskurve um einen Gitterpunkt zur Bestimmung der Kraftvektoren.	24
3.3	Kontinuumsmechanischer Druckversuch mit verzerrter Vernetzung durch hohe Verformungen im Nachbruchbereich.	26
3.4	Remeshing-Prozedur zur Neuanpassung eines stark deformierten Gitters.	27
4.1	Schematische Darstellung der Kontaktwechselwirkung zwischen angrenzenden deformierbaren, diskreten Elementen.	30
4.2	Visko-elasto-plastisches Modellkonzept.	32
4.3	Fließgrenzen des visko-elasto-plastischen Stoffmodelles.	36
4.4	Einfacher Scherversuch an einer einzelnen Schichtfläche und Abhängigkeit der Scherfestigkeit von der Schergeschwindigkeit.	36
4.5	Zweidimensionale Voronoi-Zerlegung einer zufälligen und geordneten Punktmenge.	39
4.6	Anisotrop verteilte Punktmenge zur Erzeugung einer Voronoi-Zerlegung mit abstandsabhängiger Feinheit um einen Hohlraum.	41
4.7	Voronoi-Zerlegung bei verschiedenen geometrischen Randbedingungen.	42
4.8	Voronoi-Zerlegung eines dreidimensionalen Torus.	43
4.9	Erstellung der 3D-Voronoi-Zerlegung eines Kavernenkörpers basierend auf Sonarvermessungsdaten.	44
4.10	3D-Voronoi-Modell einer Abraumhalde.	44
4.11	Drei verschiedene 2D-Voronoi-Diskretisierungen bei gleichem mittleren Durchmesser.	45
4.12	Wahrscheinlichkeitsverteilung der Korndurchmesser in verschiedenen Voronoi-Diskretisierung bei gleichem mittleren Durchmesser.	46
4.13	Wahrscheinlichkeitsverteilung der Winkel zwischen y-Achse und Korngrenznormale als Maß für die Verteilung Korngrenzorientierungen.	47
4.14	Mittlere freie Weglänge innerhalb einer 2D-Voronoi-Struktur in Abhängigkeit der mittleren Korngröße.	47
5.1	Prinzipskizze zu den Wechselwirkungen entlang von Grenzflächen.	50
5.2	Zwei verschiedene Voronoi-Diskretisierungen bei gleicher mittlerer Korngröße.	52

5.3	Makroskopischer Elastizitätsmodul und Querdehnungszahl in Abhängigkeit der Normal- und Schersteifigkeiten auf den Korngrenzen.	53
5.4	Kristalldominierte und korngrenzdominierte Verformung.	55
5.5	Prinzip der Schallmessungen und Abhängigkeit der Schallgeschwindigkeiten unter verschiedenen Deformationsformen.	56
5.6	Qualitative Darstellung der x -Geschwindigkeitskomponente während einer Durschallungssimulation (s-Welle). Anregung erfolgte am oberen Druckstempel.	59
5.7	Einhüllende Festigkeitskurve zur Ableitung der diskontinuumsmechanischen Scherfestigkeiten an Korngrenzen.	60
5.8	Ermittlung der Scherfestigkeit der Korngrenzen aus triaxialen Festigkeiten und Anpassung des Schermodells.	61
5.9	Simulation direkter Zugversuche an würfelförmigen Voronoi-Körpern.	64
5.10	Simulation eines Compact-Tension-Tests.	65
6.1	Spaltströmung zwischen parallelen Platten und Struktur der Fluiddomänen in UDEC.	69
6.2	Schematische Gegenüberstellung der stark variierenden realen Kluftöffnungsweiten und der idealisierten glatten Korngrenzen.	71
6.3	Schichtflächentopologie für die 3D-Modellierung der Kluftströmung.	72
6.4	Einzelschichtmodell mit einseitiger Fluid- bzw. Gasinjektion.	73
6.5	Druckentwicklung für die Flüssigkeits- und Gasausbreitung im einfachen Einzelschichtmodell bei verschiedenen Initialdrücken.	76
6.6	Schematische Darstellung des Berechnungsmodells zum hydraulischen Aufreißversuch	77
6.7	Ergebnis der Nachrechnung eines hydraulischen Aufreißversuches in 3DEC.	78
6.8	Benötigter hydraulischer Aufreiß-Überdruck in Abhängigkeit der aufgebrauchten Normalspannung.	79
6.9	Benötigter hydraulischer Aufreiß-Überdruck in Abhängigkeit der aufgebrauchten Normalspannung. Modifikation durch FISH-Routine.	80
6.10	Benötigter hydraulischer Aufreiß-Überdruck in Abhängigkeit verschiedener Parameter und Korrekturen.	82

6.11	Fluidausbreitung ca. 60 min nach Beginn der einseitigen, freien Infiltration in verschieden fein zerlegte Voronoi-Strukturen.	83
7.1	Diskontinuumsmechanischer zylindrischer Probenkörper mit drei verschiedenen mittleren Korngrößen.	87
7.2	Ergebnisse der diskontinuumsmechanischen Studie mit Druckversuchen an verschieden grob diskretisierten Zylinderproben.	88
7.3	Zylinderförmiger Probekörper in der diskontinuumsmechanischen Modellierung durch Voronoi-Zerlegung im Vergleich zur realen Probe.	89
7.4	Prüfkörper nach weggeregelter Druckversuch im Laborversuch und der Simulation.	90
7.5	Berechnete Tragfähigkeitskurve im Vergleich zu den Laborergebnissen.	91
7.6	Anzahl der Mikrorisse durch Zug- und Scherbeanspruchung in Abhängigkeit der axialen Deformation.	92
7.7	Windplots zur Orientierung der gebildeten Risse in verschiedenen Verformungsbereichen.	92
7.8	Volumenmessung am diskontinuumsmechanischen Modell anhand von 7 Kontrollradien.	95
7.9	Nachrechnung triaxialer Druckversuche an Steinsalzproben im Vergleich zu Labordaten.	96
7.10	Modellierte Rissbildung im Inneren des Prüfkörpers durch weggeregelter Verformung (Vertikalschnitt).	98
7.11	Berechnete Veränderung der Schallgeschwindigkeiten im Laufe eines triaxialen Druckversuches.	99
7.12	Schematische Darstellung inter- und intrakristalliner Entfestigungsprozesse in Relation zur Dilatanzentwicklung.	100
7.13	Gemessene Scherspannung und Vertikalverschiebung während eines Scherversuches an homogenem Steinsalz.	102
7.14	Modellierte Normalverschiebung im Scherversuch im Vergleich zum experimentellen Ergebnis.	103
7.15	Diskontinuumsmechanische Simulation eines Scherversuches	103
7.16	Darstellung des Pfeilermodelles und Prinzipskizze der Versuchsanordnung, sowie diskontinuumsmechanischer Nachbau des Pfeilermodelles.	105

7.17	Scherversagen eines Pfeilermodells mit Scherspannungskomponente.	106
7.18	Nachrechnung des Pfeilermodellversuches PM02.	107
7.19	Vergleich der intakt gebliebenen Pfeilerkerne nach Entfernen der Abschaltungen bei 25% Verformung..	108
7.20	Die Rissschließungs- und Verheilungsphasen im triaxialen Verheilungsversuch.	110
7.21	Zeitabhängiger Aufbau der Kohäsion für verschiedene Verheilungszeiten.	112
7.22	Scherspannungsverlauf eines mehrstufigen Scherversuches bei verschiedenem Grad der Verheilung.	113
7.23	Simulation von Verheilungseffekten in einem triaxial eingespannten Prüfkörper.	114
7.24	Extensionsversuch unter hydraulischem Druck.	115
7.25	Nachrechnung des Pfeilermodellversuches PM02.	116
7.26	Spannungsabhängigkeit der Perkolationsrichtung nach Überschreitung der minimalen Hauptspannung.	117
7.27	Schematische Darstellung einer Korngrenze im Winkel α zur Kontur.	119
7.28	Modellaufbau und Randbedingungen für die numerische Studie zur winkelabhängigen Normalspannung einer Konturkluft unter angreifendem Fluiddruck.	120
7.29	Abhängigkeit der effektiven Normalspannung einer Konturkluft in Abhängigkeit von deren Anstellwinkel.	121
8.1	Stratigraphie und Lage der Abbaue im WE-Schnitt.	124
8.2	Ersatzquerschnitt für Zwischenpfeiler.	126
8.3	Modellierte Abbaustruktur und diskontinuumsmechanische Zerlegung der Abbaupfeiler.	126
8.4	Umrechnung der realen Lastentwicklung auf das Streifenmodell. . . .	128
8.5	Senkungsverlauf an der Tagesoberfläche (Senkungszentrum) über 100 Jahre.	129
8.6	Modellierte Senkungsprofile im Scheibenmodell 1 zu verschiedenen Zeitpunkten nach Beginn des Abbaus.	130
8.7	Kriechdeformation und Konturabschaltungen der Pfeiler, Entwicklung einer Selbstversatzwirkung.	130

8.8	Ansicht des Modells für den Schnitt 2 mit angedeuteter Zerlegung des Buntsandsteins.	131
8.9	Von Förder- und Wetterstrecken durchzogener Zwischenpfeiler. . . .	132
8.10	Modellierter und gemessener Senkungsverlauf an der Tagesoberfläche im Senkungszentrum für beide Modellschnitte.	133
8.11	Simulierte relative Vertikalverschiebung im Senkungszentrum und freigesetzte kinetische Energie nach manuell induziertem Pfeilerversagen im Schnitt 1.	134
8.12	Umverteilung der Last infolge des spontanen Tragfähigkeitsverlustes eines Einzelpfeilers.	135
8.13	Auswahl des Anregungspfeilers im Scheibenmodell für Schnitt 2. . .	136
8.14	Simulierte Vertikalverschiebung im Senkungszentrum und freigesetzte kinetische Energie nach manuell induziertem Pfeilerversagen im Schnitt 2.	136
8.15	Prinzipielles Verhalten von Tangential- und Normalspannungen an der Kavernenkontur bei Druckanstieg bzw. -abfall im Horizontalschnitt .	142
8.16	Diskontinuumsmechanisches Horizontalschnittmodell der Kaverne (links) und Nahaufnahme der Blockstruktur und Vernetzung (rechts).	144
8.17	Verschiedene modellierte Druckregimes in Anlehnung an reale Fahrweisen.	145
8.18	Abhängigkeit der Gasperkolation vom Ausgangszustand bei gleicher Druckaufbaurrate und gleichem Maximaldruck.	146
8.19	Abhängigkeit der Gasperkolation vom Ausgangszustand bei gleicher Druckaufbaurrate und gleichem Maximaldruck.	147
8.20	Vergleich mit kontinuumsmechanischen Minimalspannungskriterium, Modellausschnitte 100x100m.	148
8.21	Modell der idealisierten flachen Lagerung für die Streckenlagerung wärmeentwickelnder Abfälle.	151
8.22	Modellierter Temperaturverlauf an Behälteroberflächen und Salzspiegel.	154
8.23	Prinzipiskizze des hebungsinduzierten Biegezugeffektes an der Oberkante eines Balkens.	155
8.24	Minimalspannungskriterium 30 Jahre nach Einlagerungsbeginn. . . .	156

8.25	Druckgetriebene Perkolation am Salzspiegel infolge der thermisch induzierten Hebung 30 Jahre nach Einlagerungsbeginn.	157
8.26	Verlauf der minimalen Hauptspannungen an zwei Punkten im Salinar entlang des Salzspiegels.	157
9.1	Zusätzliche Wechselwirkung zwischen einzelnen finiten Elementen im FEM/DEM-Ansatz.	161
9.2	Angepasste Vernetzung einer zerknitterten Papierseite.	164
9.3	Übergang zum Diskontinuum in einem Glasrohr unter Kompression und der Kollision mit einer Kugel.	165
11.1	Samples of rock salt with clearly visible grain structure.	172
11.2	Schematic representation of contact interactions between neighboring deformable & discrete elements.	174
11.3	Two different random Voronoi-triangulations of a cube.	174
11.4	Discontinuum-mechanical grain boundary structure as a potential fluid flow network.	176
11.5	Modeled development of fractures within a sample during a compression test.	177
11.6	Deformed discontinuum-mechanical model of a rock salt sample after testing in comparison with the real specimen.	178
11.7	Modeling of pillar spalling and eventual self-backfilling in room-and-pillar mining.	179
11.8	Modeling of contour percolation during pressure increase in a cavern after being kept at a low pressure.	179
11.9	Limited percolation of groundwater into the hydraulic barrier after emplacement of heat generating waste.	180
A.1	Einachsiale Druckversuche an zylindr. Prüfkörpern (Kraft- und Wegregelung, 100mm-Prüfkörper).	206
A.2	Nachrechnung einachsialer Druckversuche im Vergleich zu Laborergebnissen (zylindr. Prüfkörper, versch. Randbedingungen).	207
A.3	Entstehung vertikaler Rissstrukturen bis in den Probenkern bei kraftgeregeltem Versuchsablauf.	208

A.4	Vergleich der Prüfkörperverformung in diskontinuumsmechanischer Simulation und Laborversuch ($\sigma_3 = 2$ MPa).	209
A.5	Pfeilermodell-Tragfähigkeit bei zusätzlicher Scherkomponente. . . .	210
A.6	Nachrechnung des Pfeilermodellversuches (Erweiterte Darstellung, Stützwirkung durch Breitfließen und Abschalungen).	211
A.7	Nachrechnung der Pfeilermodellversuche mit deviatorischer Spannungskomponente.	212
A.8	Pfeilermodelle mit deviatorischer Komponente nach Scherbruch im Labor und im Modell.	213
A.9	Abhängigkeit der Perkulationsrichtung vom triaxialen Spannungsfeld im Laborversuch.	214
B.1	Verwendete Stoffmodellparameter für die Anwendung Kammer-Pfeiler-Abbau (Teil 1).	216
B.2	Verwendete Stoffmodellparameter für die Anwendung Kammer-Pfeiler-Abbau (Teil 2).	216
B.3	Schichtflächenparameter für Sandsteinstrennflächen.	217
B.4	Modellierte relative Senkungsentwicklung Tagesoberfläche im Senkungszentrum des Schnittmodells 1.	218
B.5	Entwicklung von Kluftöffnungen an der Abbaukante im Scheibenmodell für Schnitt 1.	219
B.6	Verwendete Stoffmodellparameter für die Anwendung hochfrequente Kavernenspeicherungen	220
B.7	Verwendete Stoffmodellparameter für das Anwendungsbeispiel Endlager in flacher Lagerung (Teil 1)	221
B.8	Verwendete Stoffmodellparameter für das Anwendungsbeispiel Endlager in flacher Lagerung (Teil 2)	222
B.9	Verwendete Stoffmodellparameter für das Anwendungsbeispiel Endlager in flacher Lagerung (Teil 3)	222
B.10	Verwendete Stoffmodellparameter für das Anwendungsbeispiel Endlager in flacher Lagerung (Teil 4)	223
B.11	Verwendete Streckengeometrien und -abstände für die Modellierung der Streckenlagerung.	224

B.12	Zeitabhängiger Verlauf der Wärmeleistung der Pollux-10 Behälter und das dazugehörige Pseudonuklid-Spektrum.	225
B.13	Abhängigkeit des Versatzdruckes von trockenem Salzgrus von Verformungsgeschwindigkeit und Temperatur.	226
B.14	Konturplot der Temperaturentwicklung in der Nähe des Einlagerungsbereiches.	227
B.15	Konturplot der thermisch induzierten Vertikalverschiebungen.	228
B.16	Verlauf der Vertikalverschiebungen an zwei Punkten zentral oberhalb des Einlagerungsbereiches.	229

Tabellenverzeichnis

3.1	Übersicht geläufiger Simulationscodes und ihrer Berechnungsmethode. . .	22
5.1	Materialparameter der Durchschallungssimulation eines Voronoi-Probekörpers.	58
5.2	Schermodellparameter der Korngrenzen für die ergänzenden Untersuchungen zur mikroskopischen und makroskopischen Zugfestigkeit.	63
7.1	Materialparameter der Coarse-Graining Vorstudie eines einaxialen Druckversuches.	86
7.2	Materialparameter zur Untersuchung der Winkelabhängigkeit der Normalspannung auf Kluftflächen entlang einer Hohlraumkontur unter angreifendem Fluiddruck.	120
8.1	Eckdaten der untersuchten Druckregimes	145
8.2	Stratigraphische Schichten und deren Mächtigkeiten im Modell der idealisierten flachen Lagerung	151

Anhang A

Validierung - weitere Abbildungen und Daten

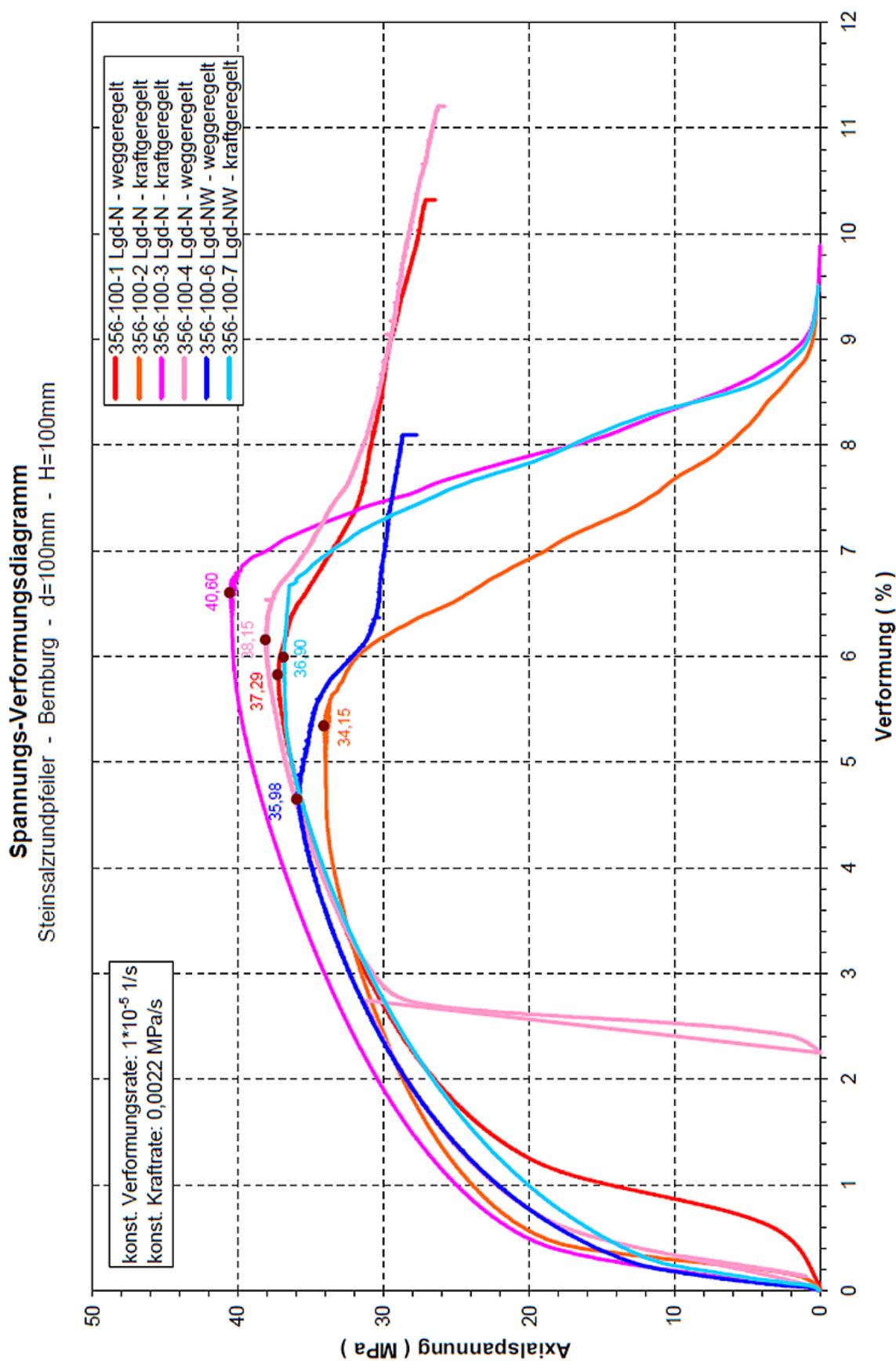


Abb. A.1: Einachsiale Druckversuche an zylindr. Prüfkörpern
(Kraft- und Wegregelung, 100mm-Prüfkörper).

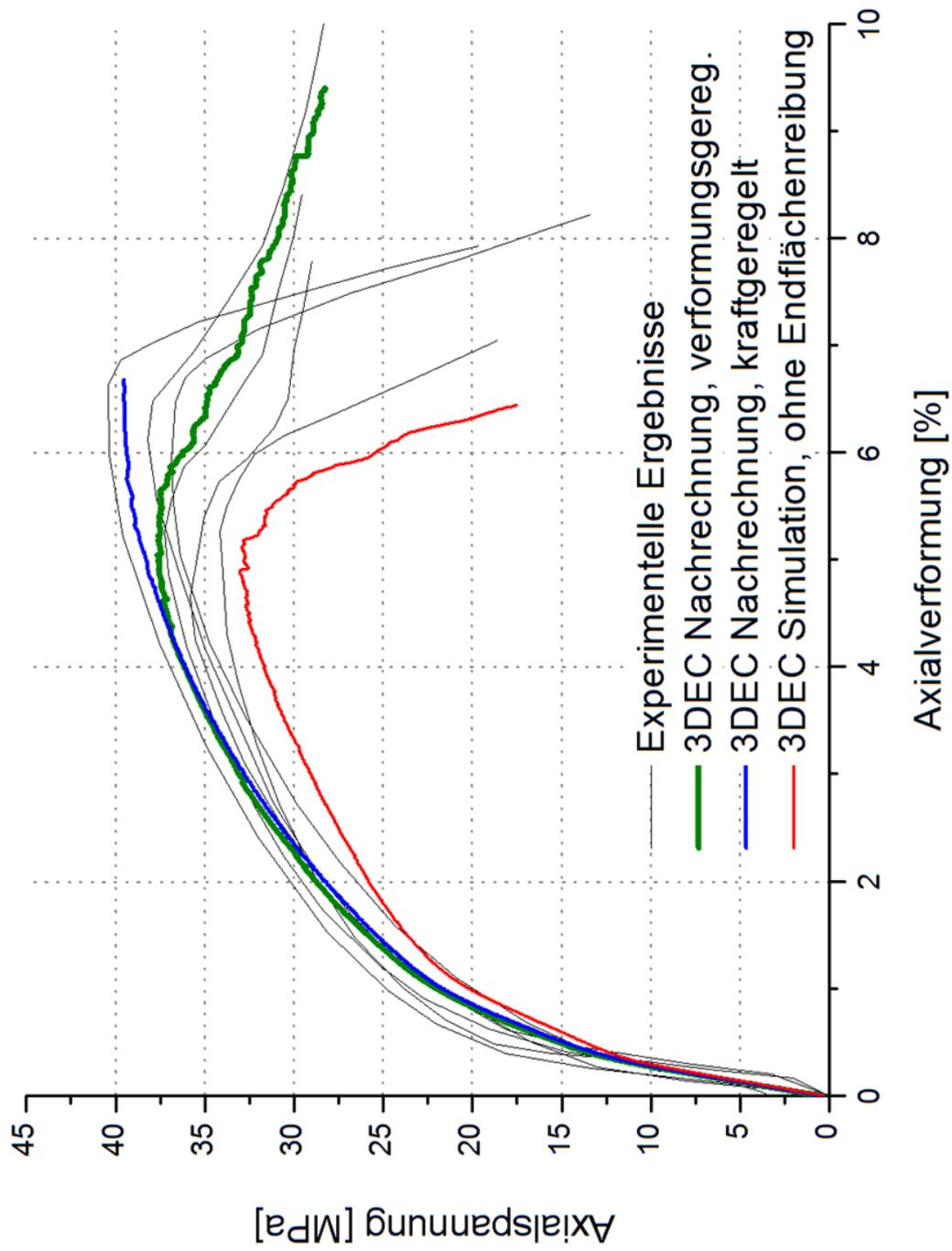


Abb. A.2: Nachrechnung einachsialer Druckversuche im Vergleich zu Laboreergebnissen (zylindr. Prüfkörper, versch. Randbedingungen).

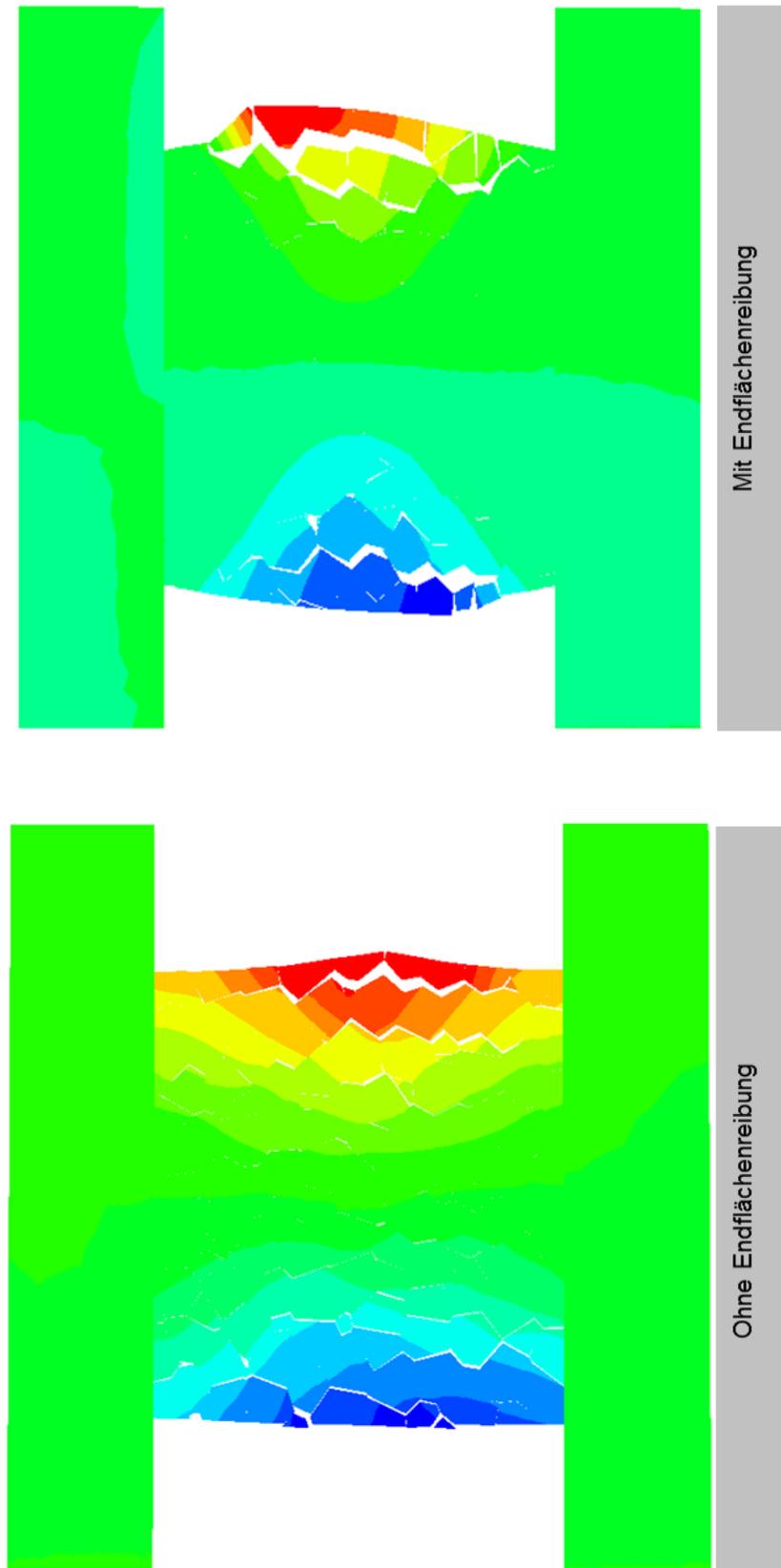


Abb. A.3: Entstehung vertikaler Rissstrukturen bis in den Probenkern bei kraftregeltem Versuchsablauf.

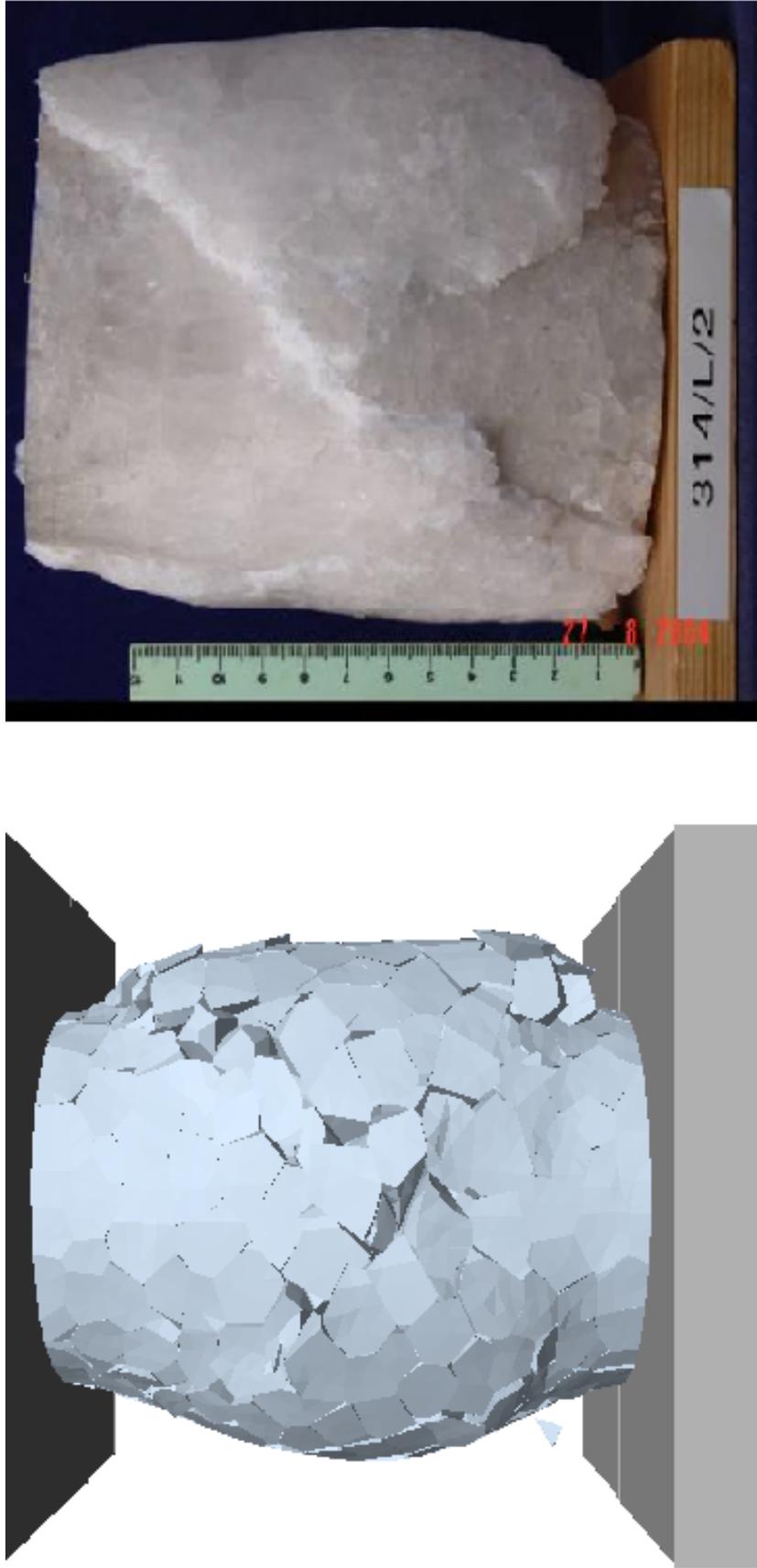


Abb. A.4: Vergleich der Prüfkörperverformung in diskontinuumsmechanischer Simulation und Laborversuch ($\sigma_3 = 2 \text{ MPa}$).

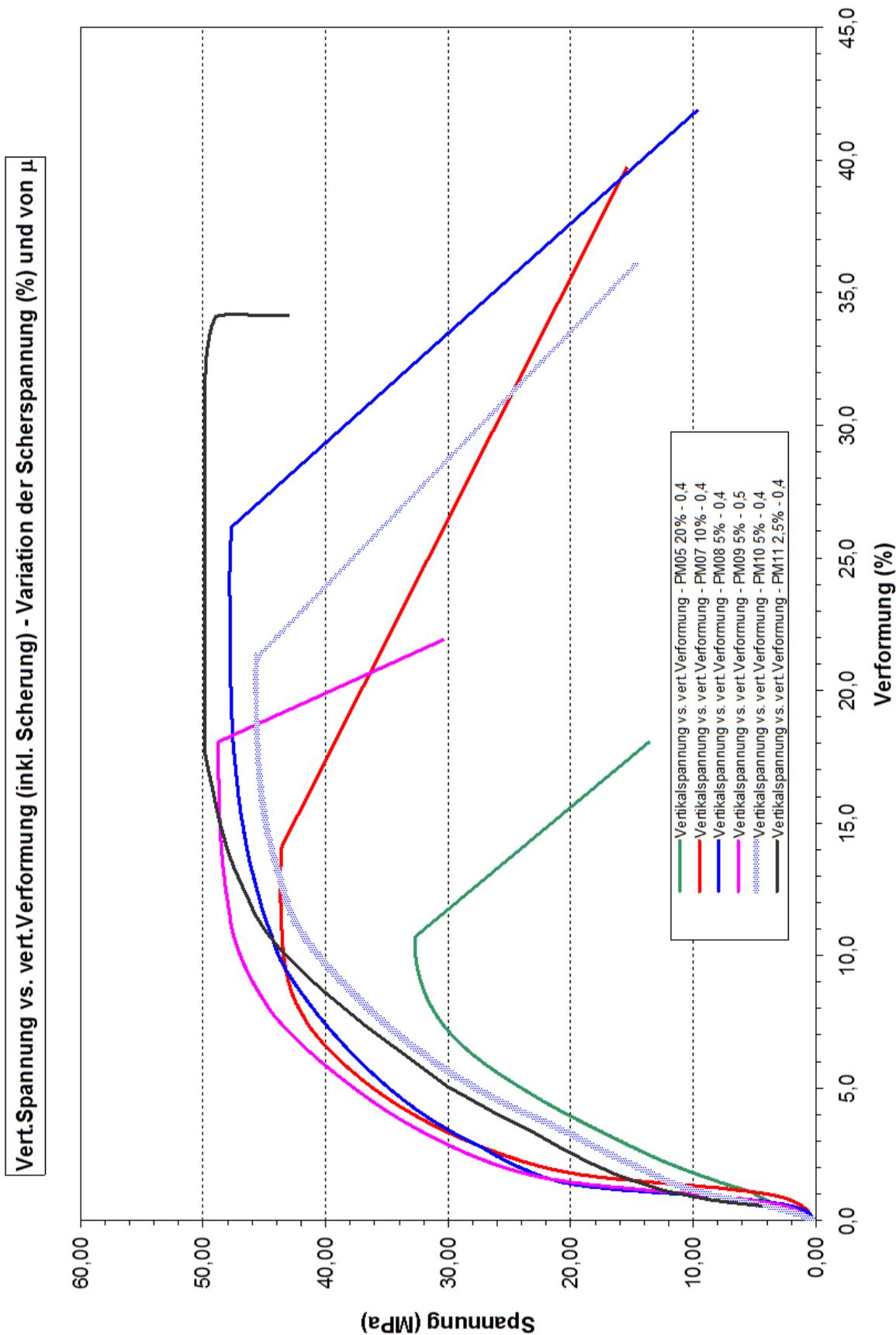


Abb. A.5: Pfeilermodell-Tragfähigkeit bei zusätzlicher Scherkomponente.

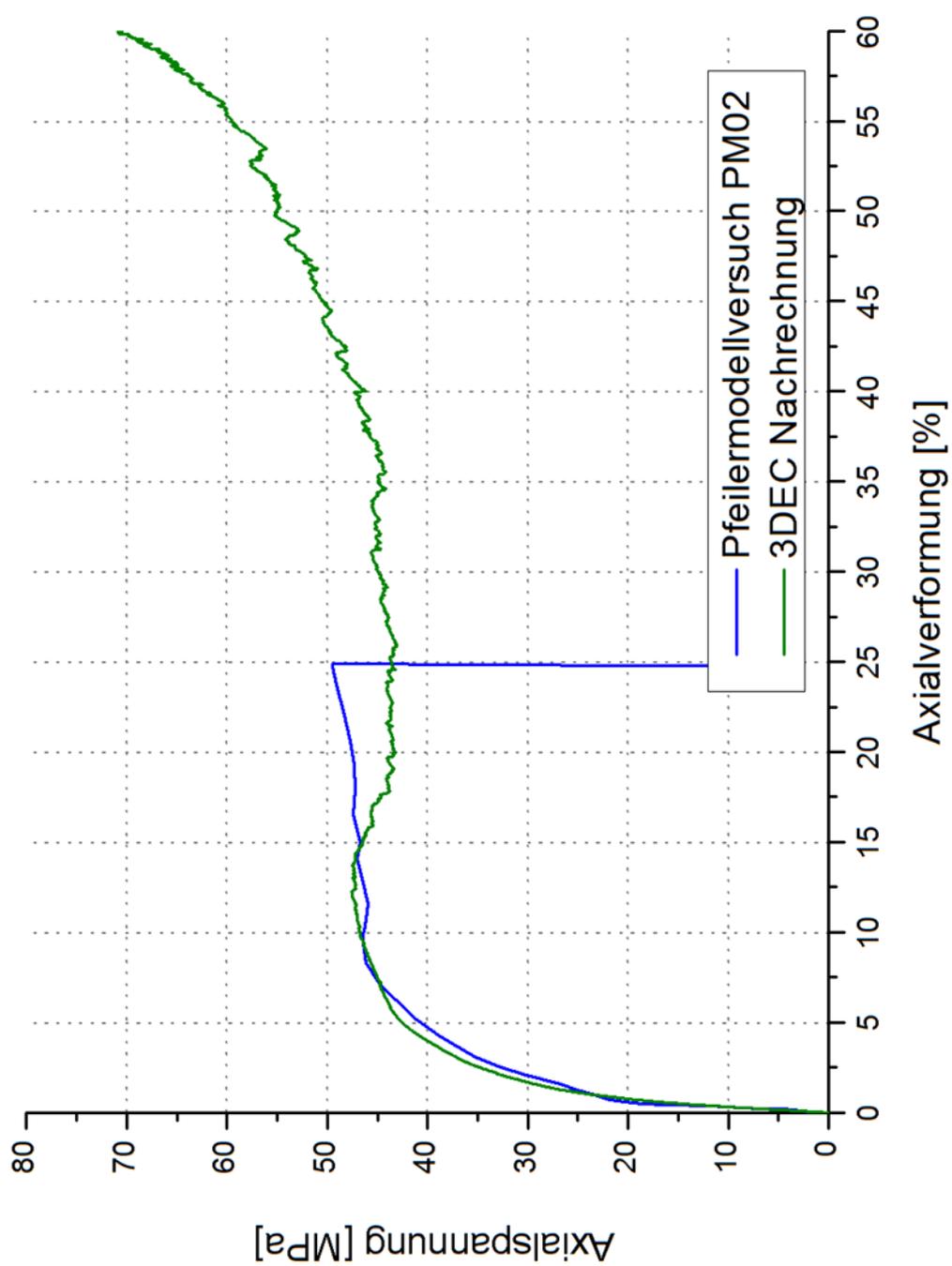


Abb. A.6: Nachrechnung des Pfeilermodellversuches (Erweiterte Darstellung, Stützwirkung durch Breitfließen und Abschaltungen).

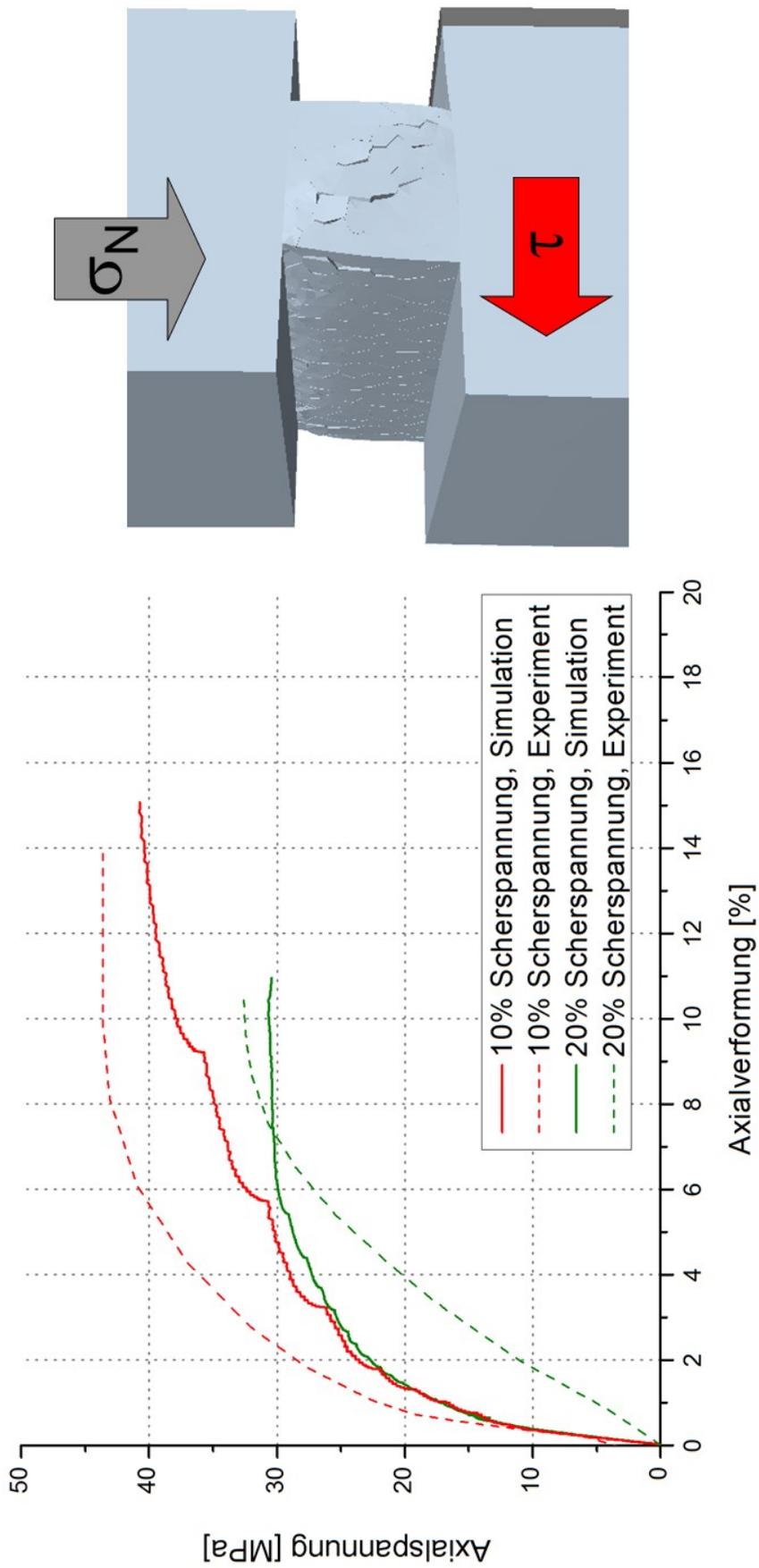


Abb. A.7: Nachrechnung der Pfeilermodellversuche mit deviatorischer Spannungskomponente.

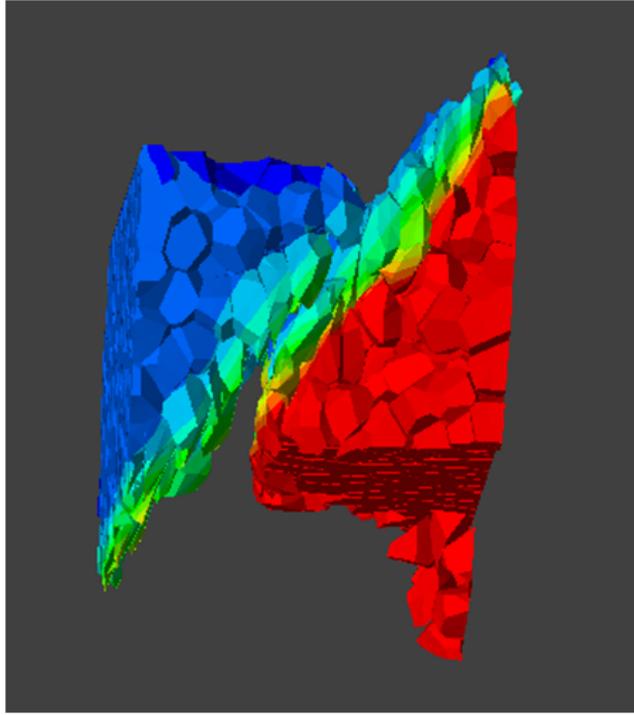
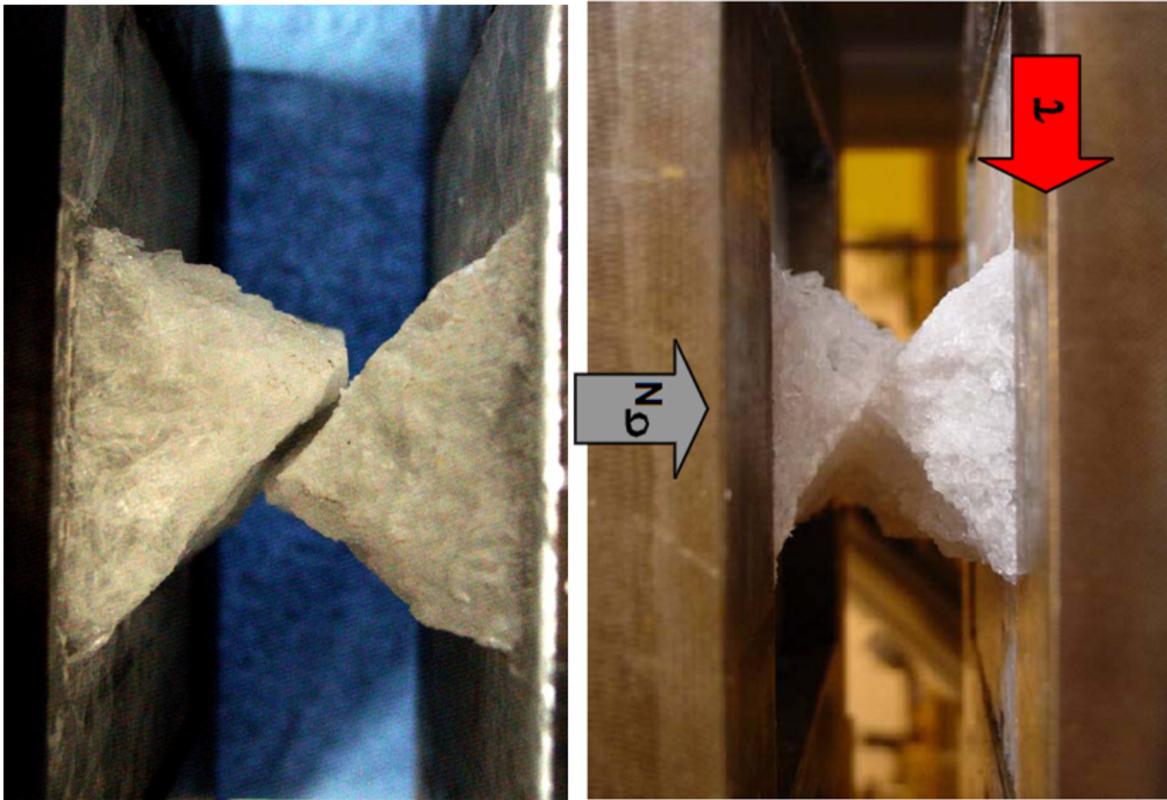


Abb. A.8: Pfeilermodelle mit deviatorischer Komponente nach Scherbruch im Labor (links) und im Modell (rechts).

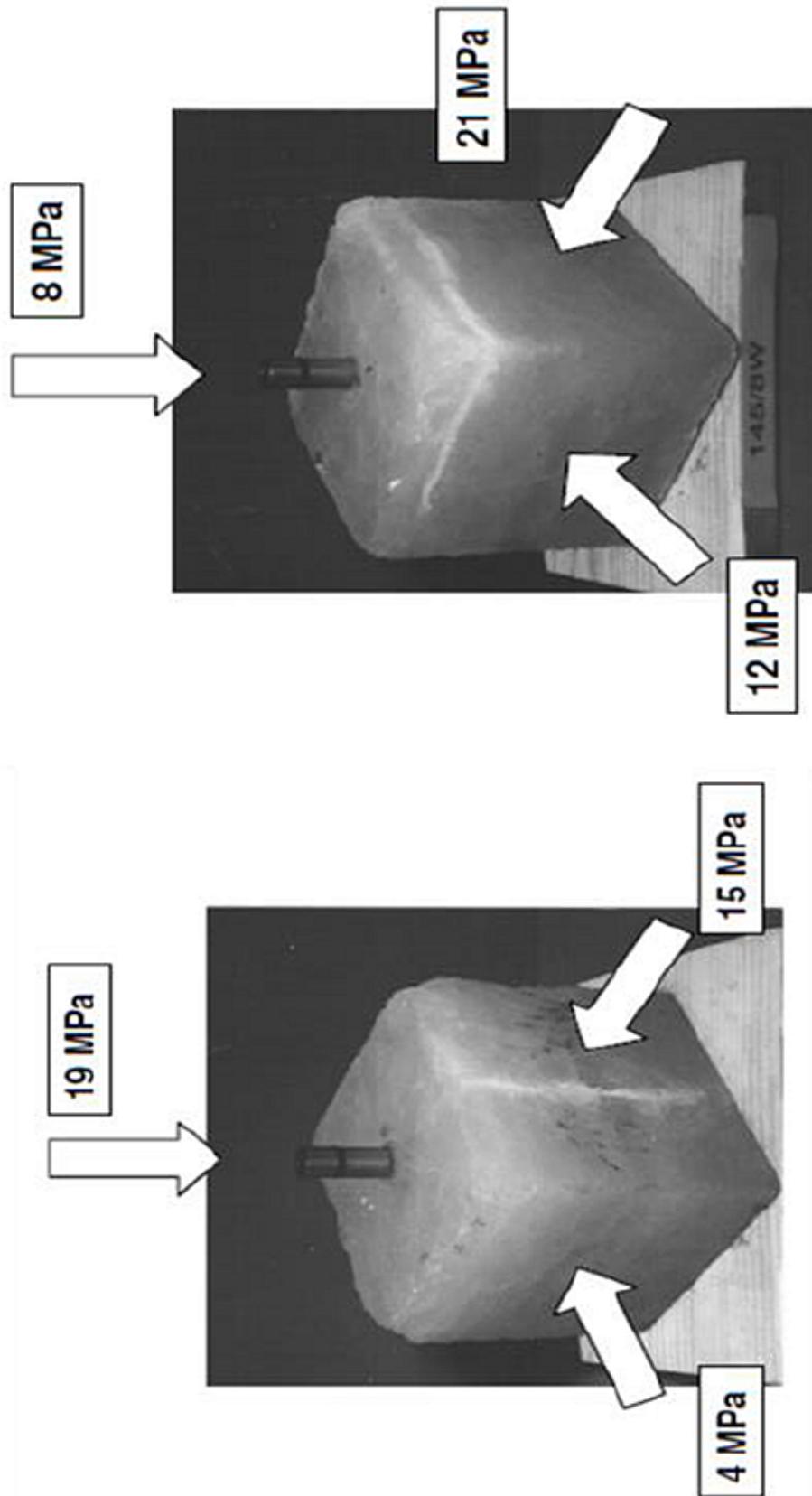


Abb. A.9: Abhängigkeit der Perkolationsrichtung vom triaxialen Spannungsfeld im Laborversuch.

Anhang B

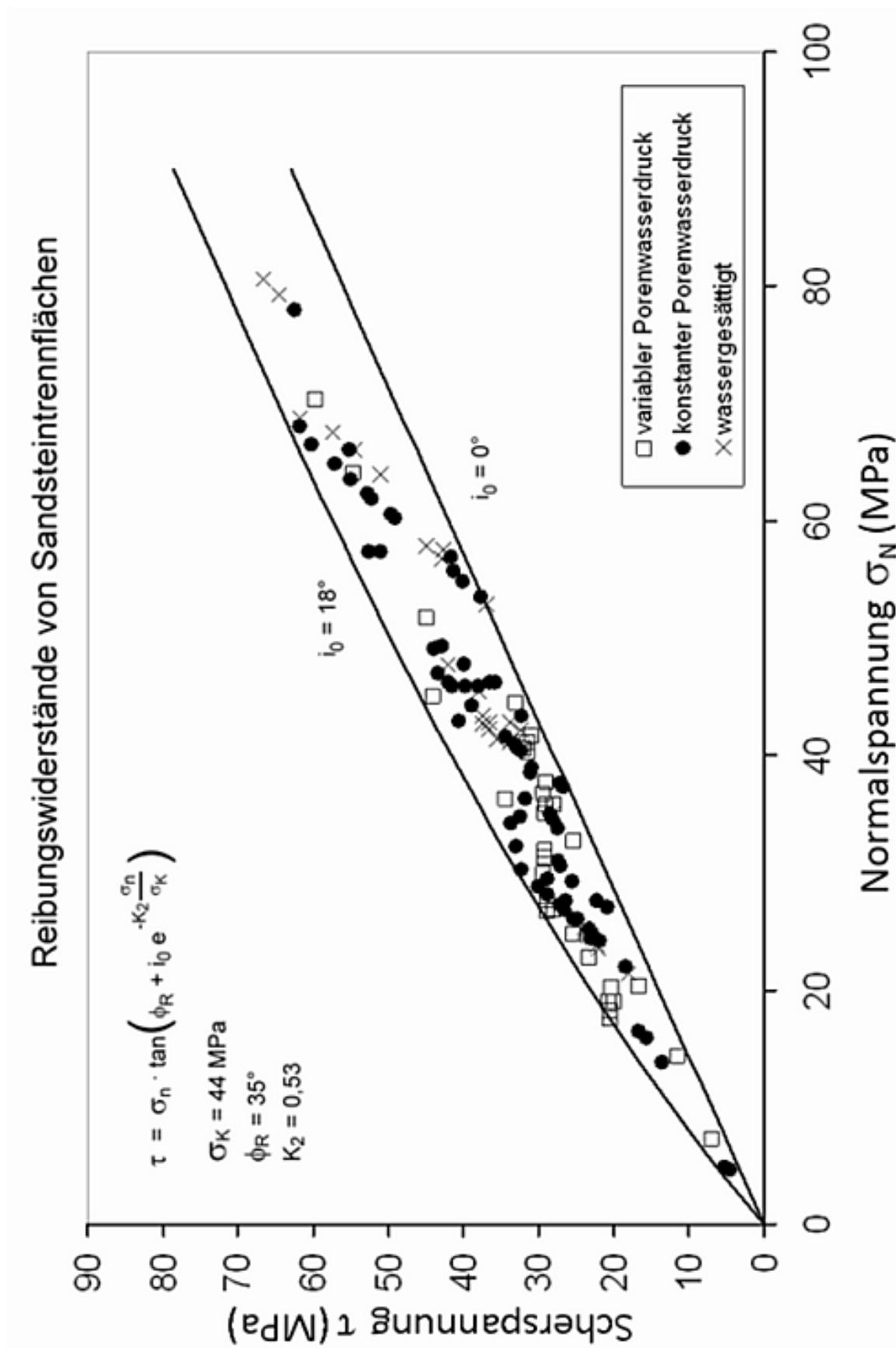
Anwendungen - Modellparameter und ergänzende Abbildungen

Stoffmodellparameter Minkley		Schermmodellparameter Minkley	
Modellbezeichnung	Kammer-Pfeiler-Abbau	Kontakt von	Steinsalz-Steinsalz
Materialart	Steinsalz	Normalsteifigkeit k_N [MPa/m]	10^5
Dichte $[kg/m^3]$	2160	Schersteifigkeit k_S [MPa/m]	$2 \cdot 10^4$
Kompressionsmodul K [GPa]	24	Krümmungsparameter K_1	0,02
Schermodul G [GPa]	14	Krümmungsparameter K_2	0,02
Druckfestigkeit σ_D [MPa]	12	Kontaktfestigkeit σ_K [MPa]	1
Max. eff. Festigkeit σ_{Max} [MPa]	40	Restreibungswinkel Φ_R [°]	15
Krümmung σ_{phi} [MPa]	7	Aufweitwinkel i_0 [°]	10
Zugfestigkeit [MPa]	4	Entfestigungsstanz L_1 [m]	0,01
Maxwell-Viskosität η_M [MPa·d]	$2 \cdot 10^8$	Rauhigkeit L_2 [m]	0,01
Kelvin-Viskosität η_K [MPa·d]	$1 \cdot 10^{30}$	Max. Diff. Reibungskoeff. $\Delta\mu_{Max}$	2,3
Kelvin-Schermodul G_K [GPa]	63	Krit. Scherverschiebungsgeschw. v_k	10^{-30}
m [MPa^{-n}]	0.5	Geschwindigkeitsfaktor b	1,2
n [-]	0.89	Kohäsion c [MPa]	5,5
		Zugfestigkeit σ_Z [MPa]	4

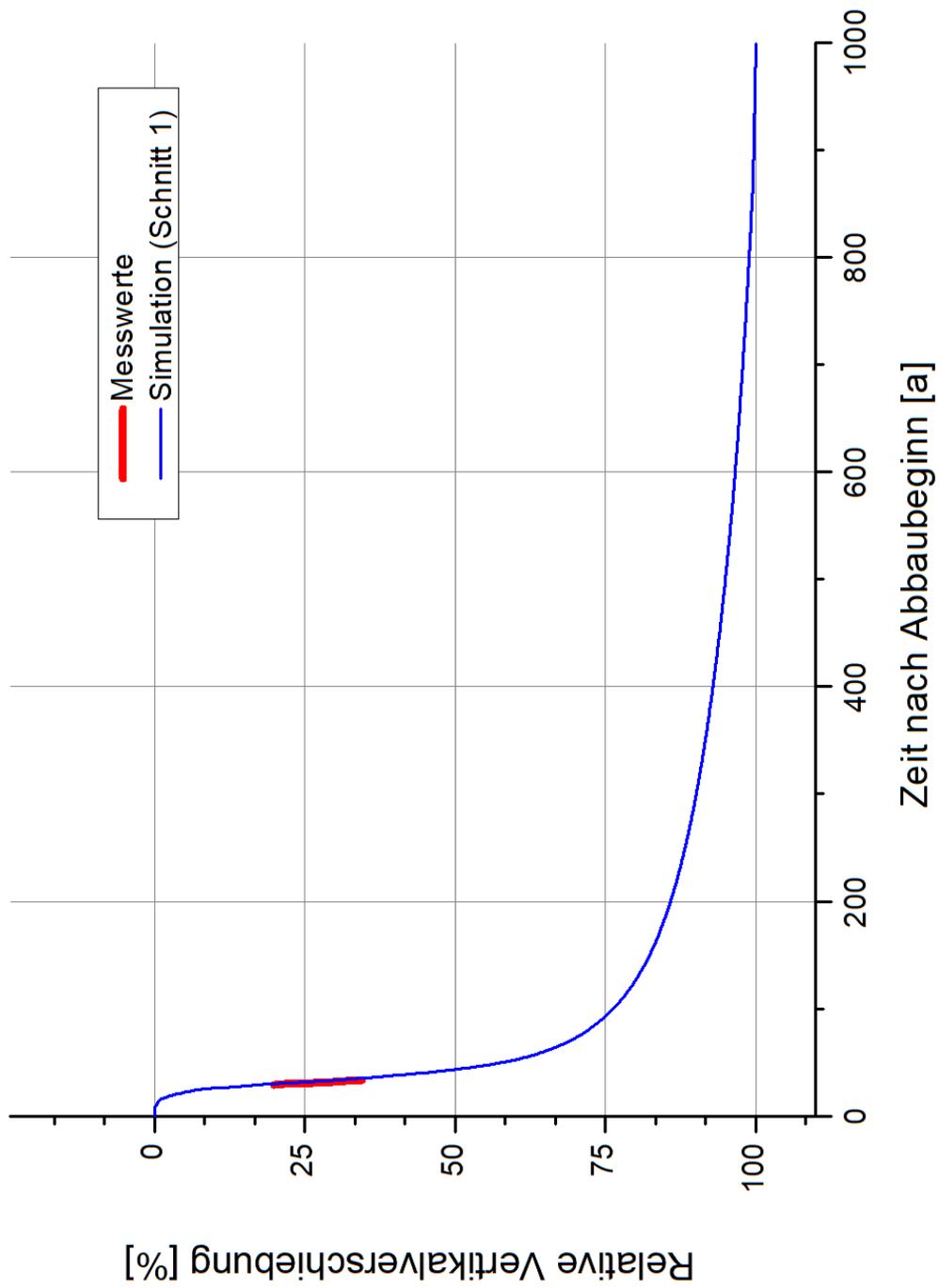
Anlage B.1: Verwendete Stoffmodellparameter für die Anwendung Kammer-Pfeiler-Abbau (Teil 1).

Verformungsabhängigkeit der plast. Parameter	
ϵ [%]	0 0,5 2 5 10 15 20
Druckfestigkeit σ_D [MPa]	12 20 26 36 38 40 40
Max. eff. Festigkeit σ_{Max} [MPa]	42 46 58 59 64 70 80

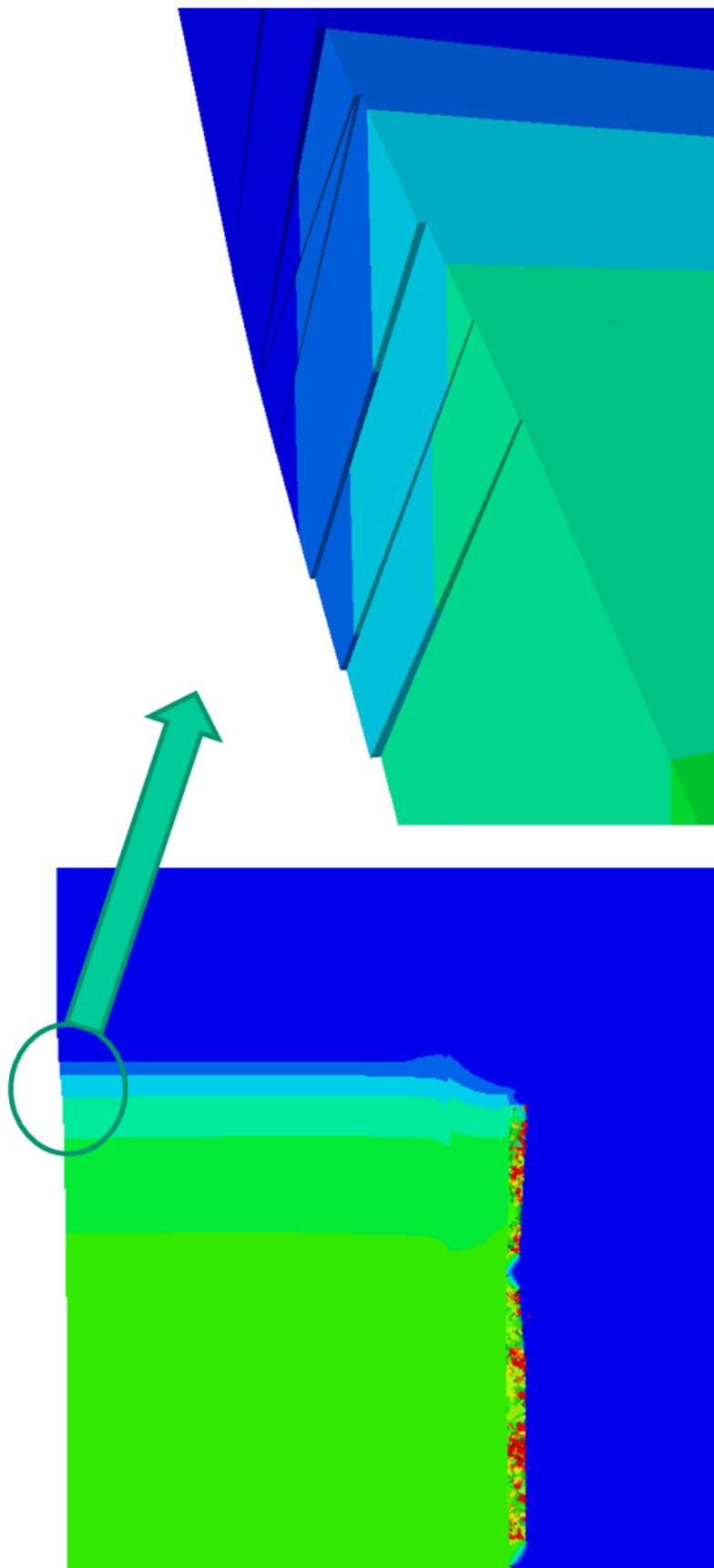
Anlage B.2: Verwendete Stoffmodellparameter für die Anwendung Kammer-Pfeiler-Abbau (Teil 2).



Anlage B.3: Schichtflächenparameter für Sandsteintrennflächen.



Anlage B.4: Modellierete relative Senkungsentwicklung Tagesoberfläche im Senkungszentrum des Schnittmodells 1.



Anlage B.5: Entwicklung von Kluftöffnungen an der Abbaukante im Scheibenmodell für Schnitt 1.

Stoffmodellparameter Minkley		Schermmodellparameter Minkley	
Modellbezeichnung	Hochfrequ. Kavernenspeicher	Kontakt von	Steinsalz-Steinsalz
Materialart	Steinsalz	Normalsteifigkeit k_N [MPa/m]	10^5
Dichte $[kg/m^3]$	2160	Schersteifigkeit k_S [MPa/m]	$2 \cdot 10^4$
Kompressionsmodul K [GPa]	24	Krümmungsparameter K_1	1
Schermodul G [GPa]	14	Krümmungsparameter K_2	0,4
Druckfestigkeit σ_D [MPa]	6	Kontaktfestigkeit σ_K [MPa]	10
Max. eff. Festigkeit σ_{Max} [MPa]	40	Restreibungswinkel Φ_R [°]	27
Krümmung σ_{phi} [MPa]	3	Aufgleitwinkel i_0 [°]	26
Zugfestigkeit [MPa]	0	Entfestigungsdistanz L_1 [m]	0,003
Maxwell-Viskosität η_{M0} [MPa·d]	$9 \cdot 10^{-3}$	Rauhigkeit L_2 [m]	0,003
Kelvin-Viskosität η_K [MPa·d]	$6,3 \cdot 10^4$	Max. Diff. Reibungskoeff. $\Delta\mu_{Max}$	1,0
Kelvin-Schermodul G_K [GPa]	$3,1 \cdot 10^5$	Krit. Scherverschiebungsgeschw. v_k	10^{-30}
m $[Mpa^{-n}]$	0,2	Geschwindigkeitsfaktor b	1,2
		Kohäsion c [MPa]	1
		Zugfestigkeit σ_Z [MPa]	0

Anlage B.6: Verwendete Stoffmodellparameter für die Anwendung hochfrequente Kavernenspeicherungen

Stoffmodellparameter Steinsalze/Anhydritmittelsalz		Stoffmodellparameter Kaliflöze	
Dichte [kg/m^3]	2150	Dichte [kg/m^3]	2160
Kompressionsmodul K [GPa]	16,6	Kompressionsmodul K [GPa]	11
Schermodul G [GPa]	10	Schermodul G [GPa]	6,3
Druckfestigkeit σ_D [MPa]	12	Druckfestigkeit σ_D [MPa]	12
Max. eff. Festigkeit σ_{Max} [MPa]	33,6	Max. eff. Festigkeit σ_{Max} [MPa]	33,6
Krümmung σ_{Phi} [MPa]	3,4	Krümmung σ_{Phi} [MPa]	3,4
Zugfestigkeit σ_Z [MPa]	0	Zugfestigkeit σ_Z [MPa]	0
Maxwell-Viskosität η_{M0} [MPa·d]	$\alpha \cdot 2 \cdot 10^{25}$	Maxwell-Viskosität η_{M0} [MPa·d]	5
Kelvin-Viskosität η_K [MPa·d]	$1 \cdot 10^{30}$	Kelvin-Viskosität η_K [MPa·d]	$1 \cdot 10^{30}$
Kelvin-Schermodul G_K [GPa]	63	Kelvin-Schermodul G_K [GPa]	63
m [Mpa^{-n}]	58	m [Mpa^{-n}]	4,3
n [-]	0,06	n [-]	0,26
Stoffmodellparameter Roter Salztun		Vorfaktor α der Viskositäten	
Dichte [kg/m^3]	2150	Na2	1
Kompressionsmodul K [GPa]	16,6	Na3	4
Schermodul G [GPa]	10	AM3	8
Druckfestigkeit σ_D [MPa]	12	Na4	16
Max. eff. Festigkeit σ_{Max} [MPa]	33,6		
Krümmung σ_{Phi} [MPa]	3,4		Aktivierungsenergie $Q = 54$ kJ/mol
Zugfestigkeit σ_Z [MPa]	0		
Maxwell-Viskosität η_{M0} [MPa·d]	0,015		
Kelvin-Viskosität η_K [MPa·d]	$1 \cdot 10^{30}$		
Kelvin-Schermodul G_K [GPa]	63		
m [Mpa^{-n}]	0		
n [-]	1		

Anlage B.7: Verwendete Stoffmodellparameter für das Anwendungsbeispiel Endlager in flacher Lagerung (Teil 1)

Weitere Stoffmodellparameter (elastisch)			
	Dichte [kg/m^3]	Kompressionsmodul K [GPa]	Schermodul G [GPa]
Quartär	2000	0,1	0,03
Tertiär	2100	0,49	0
Buntsandstein	2500	10,8	5,9
Anhydrit	2700	40	24
Liegendes	2500	12	6,7

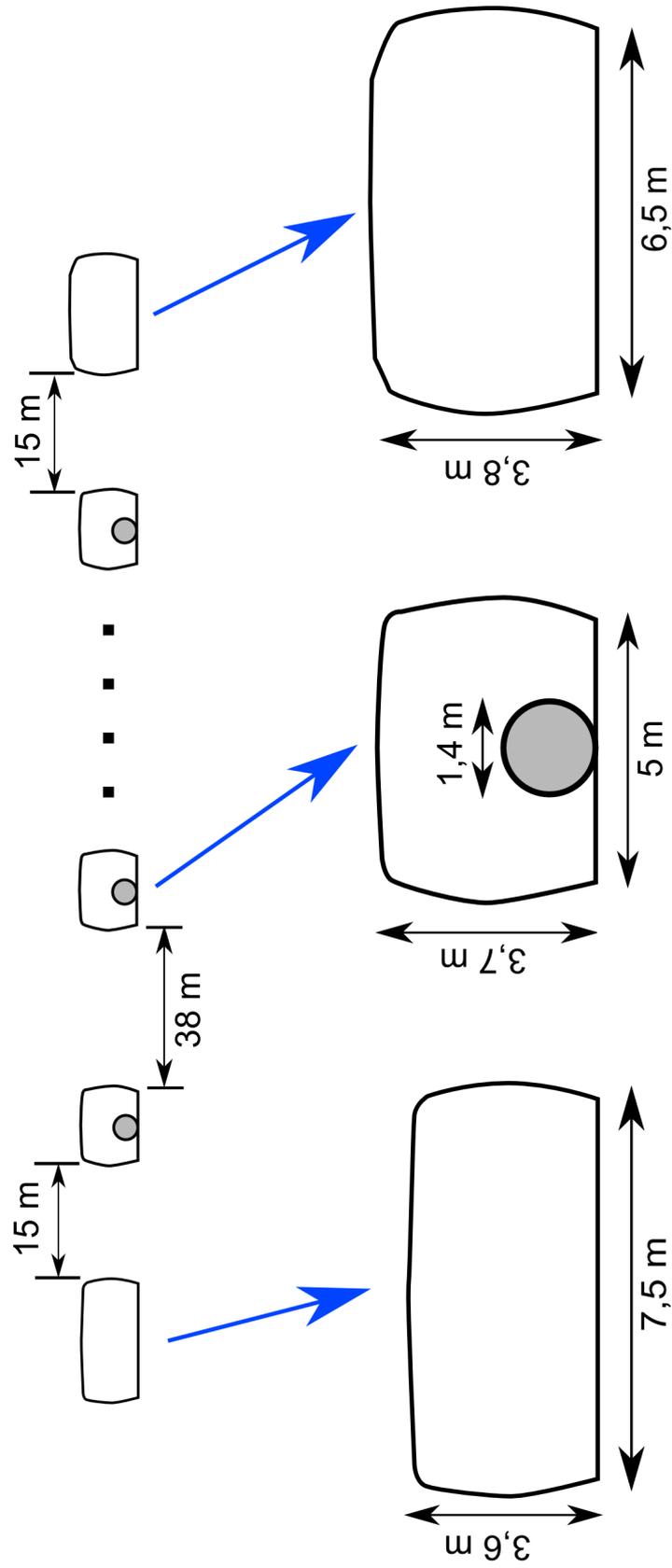
Anlage B.8: Verwendete Stoffmodellparameter für das Anwendungsbeispiel Endlager in flacher Lagerung (Teil 2)

Ubiquitous Joints-Parameter Buntsandstein/Quartär/Tertiär	
Dichte [kg/m^3]	2100
Reibungswinkel Matrix [$^\circ$]	20
Reibungswinkel Schwächeflächen [$^\circ$]	15
Kohäsion Matrix [MPa]	2,0
Kohäsion Schwächeflächen [MPa]	0,0
Zugfestigkeit Matrix [MPa]	1,0
Zugfestigkeit Schwächeflächen [MPa]	0,0
Orientierung Schwächeflächen	vertikal

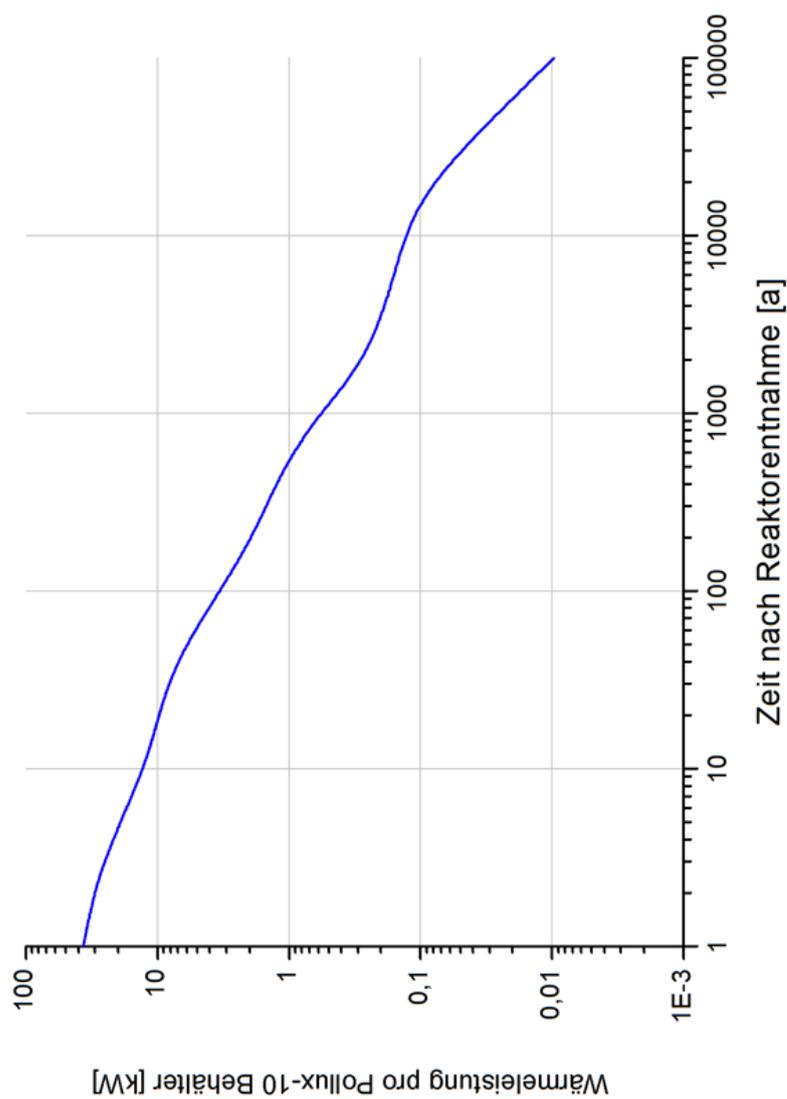
Anlage B.9: Verwendete Stoffmodellparameter für das Anwendungsbeispiel Endlager in flacher Lagerung (Teil 3)

Thermische Materialparameter				
Material	Wärmeleitfähigkeit $[W/(mK)]$	spez. Wärmekapazität $[J/(kg \cdot K)]$	Ausdehnungskoeffizient α $[1/K]$	
Deckgebirge u. Liegendes Kaliflöze	2,2	860	10^{-5}	
Anhydrit	1,5	900	$2,5 \cdot 10^{-5}$	
Steinsalz	4,2	860	$1,6 \cdot 10^{-5}$	
Salzgrus	gemäß Gl. (8.9)	860	$4 \cdot 10^{-5}$	
Stahlbehälter	gemäß Gl. (8.10)	gemäß Gl. (8.11)	$4 \cdot 10^{-5}$	
	40	500	$1,3 \cdot 10^{-5}$	

Anlage B.10: Verwendete Stoffmodellparameter für das Anwendungsbeispiel Endlager in flacher Lagerung (Teil 4)

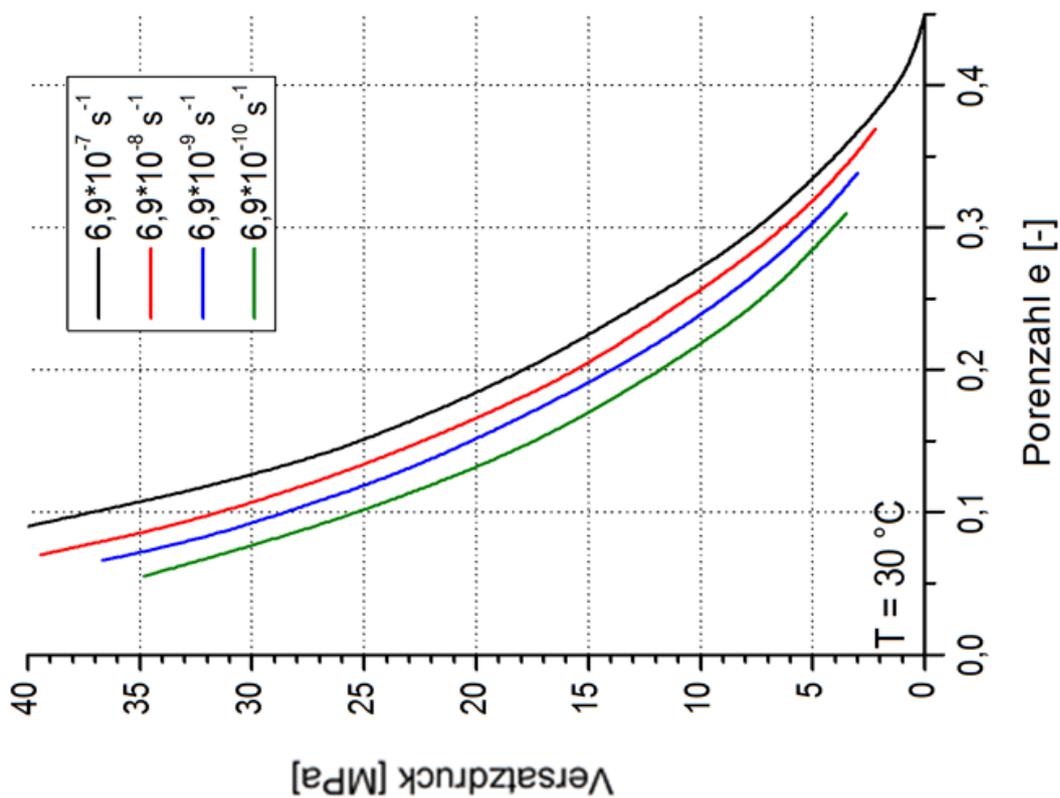
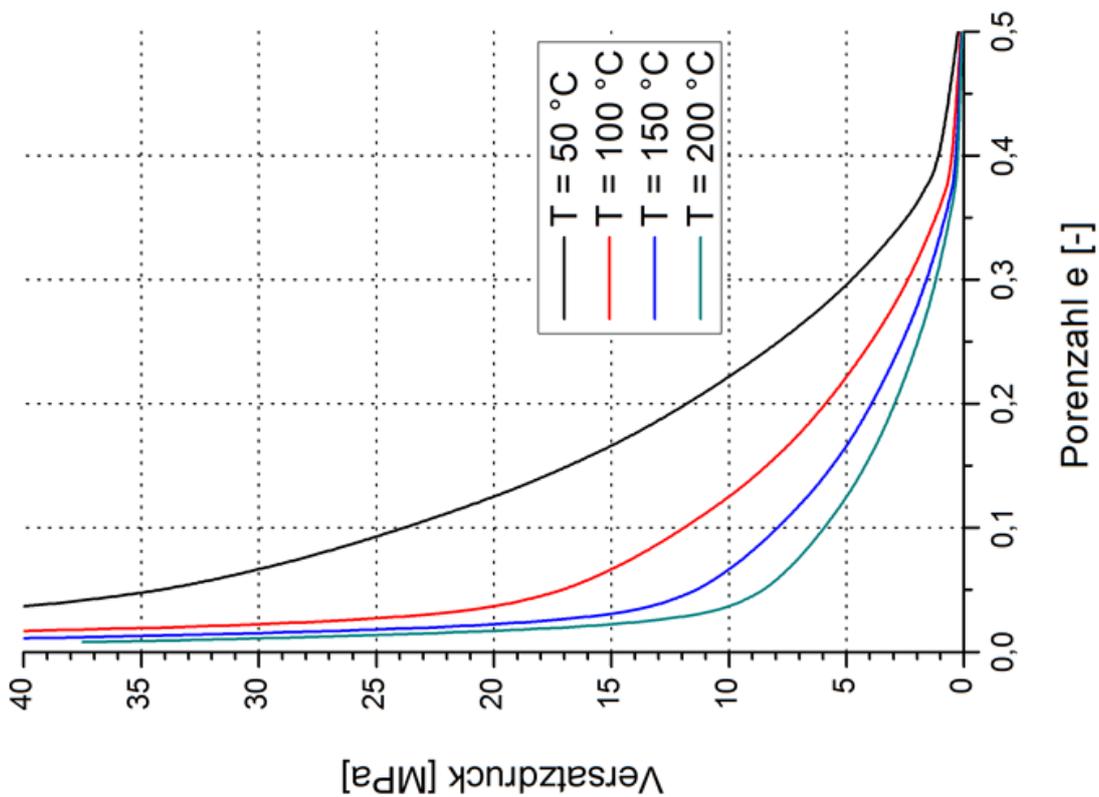


Anlage B.11: Verwendete Streckengeometrien und -abstände für die Modellierung der Streckenlagerung in Anlehnung an [89]

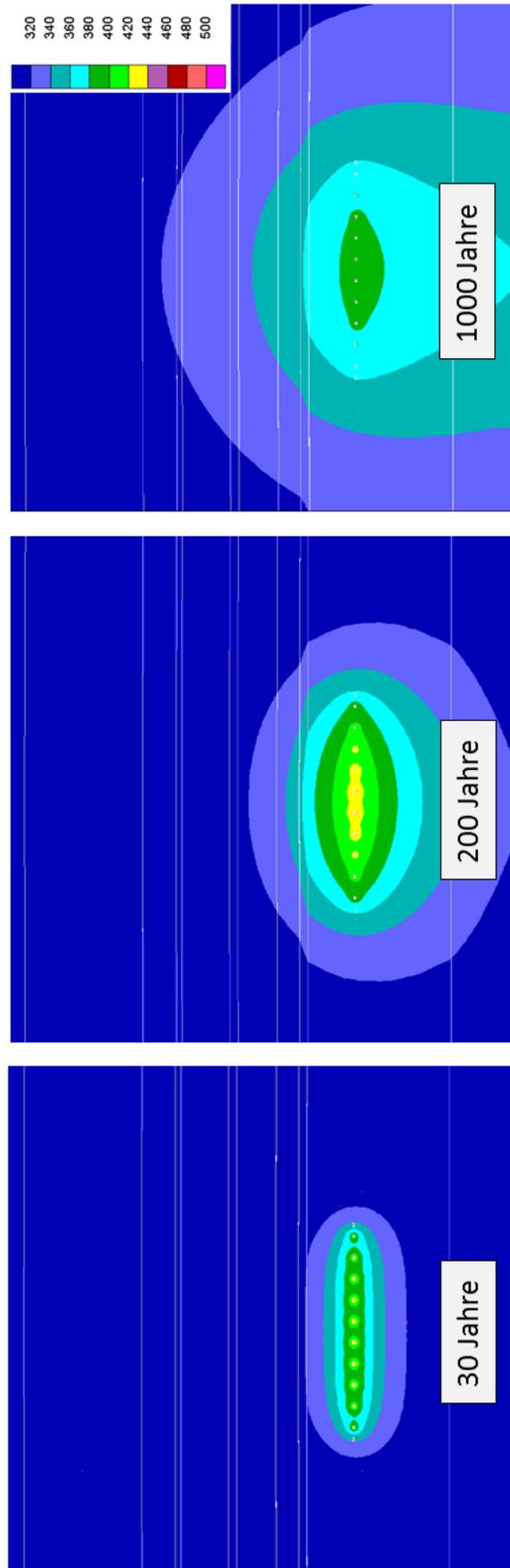


	Nuklid 1	Nuklid 2	Nuklid 3	Nuklid 4	Nuklid 5
P [kW]	$3,196 \cdot 10^1$	$1,135 \cdot 10^1$	$2,157 \cdot 10^0$	$2,051 \cdot 10^{-1}$	$9,134 \cdot 10^{-3}$
$t_{1/2}$ [a]	2,186	$3,234 \cdot 10^1$	$3,972 \cdot 10^2$	$1,373 \cdot 10^4$	$7,632 \cdot 10^5$

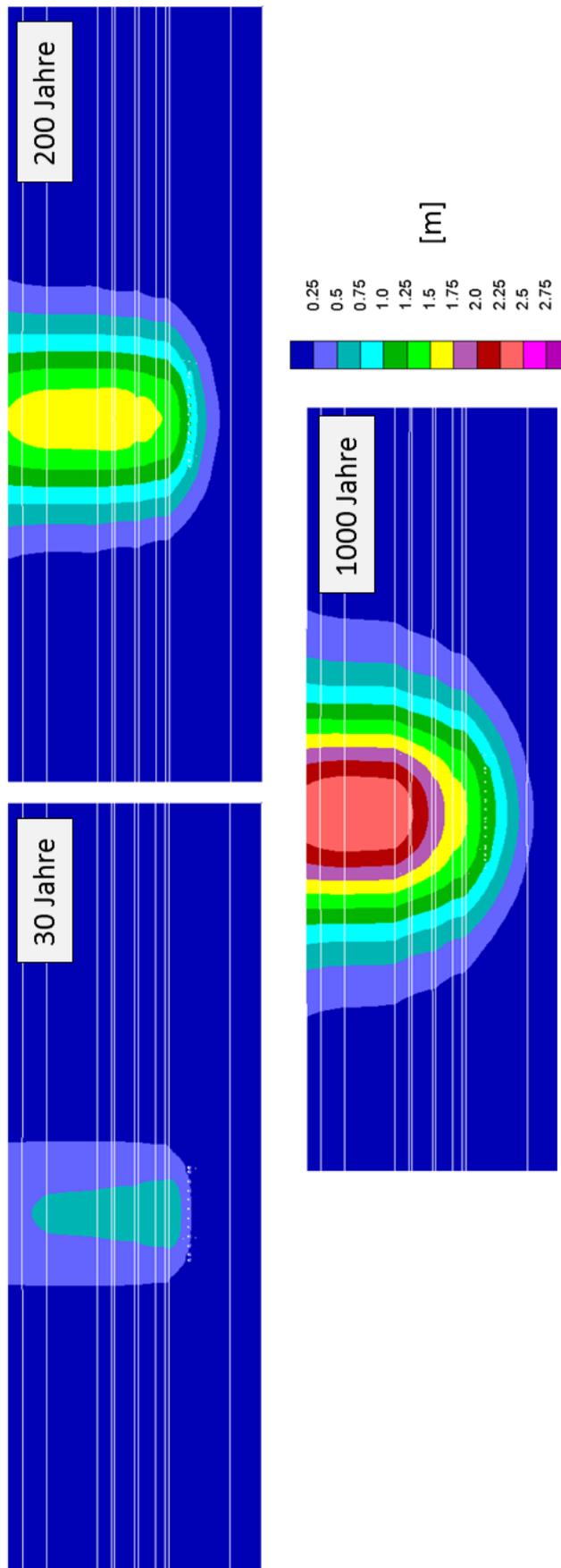
Anlage B.12: Zeitabhängiger Verlauf der Wärmeleistung der Pollux-10 Behälter und das dazugehörige Pseudonuklid-Spektrum nach [89].



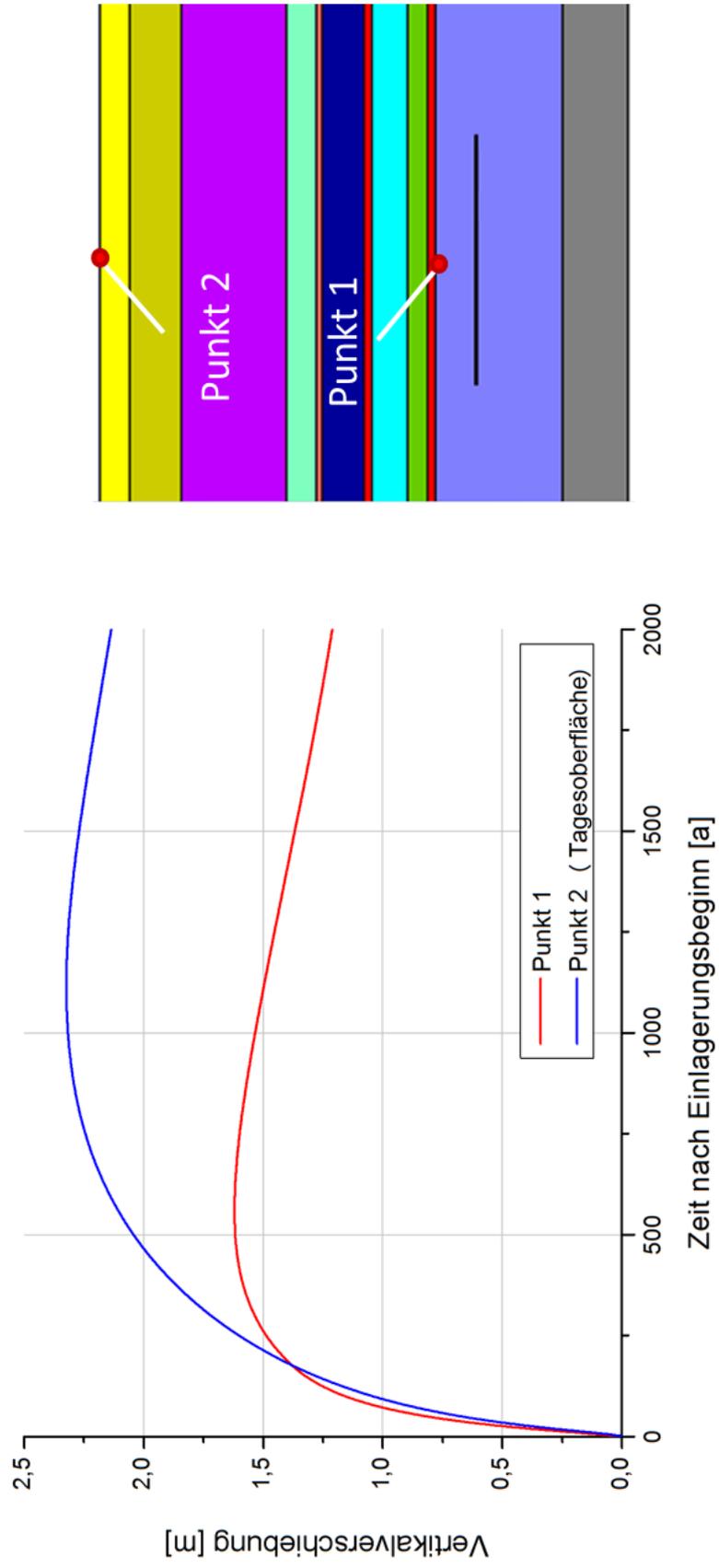
Anlage B.13: Abhängigkeit des Versatzdruckes von trockenem Salzgrus von Verformungsgeschwindigkeit (links) und Temperatur (rechts) nach [92]



Anlage B.14: Konturplot der Temperaturentwicklung in der Nähe des Einlagerungsbereiches (Temperatur in Kelvin).



Anlage B.15: Konturplot der thermisch induzierten Vertikalverschiebungen.



Anlage B.16: Verlauf der Vertikalverschiebungen an zwei Punkten zentral oberhalb des Einlagerungsbereiches.

