



Numerische Modelle zum Deformationsverhalten rigider Körper in einer plastischen Matrix: Anwendung auf Abfallgebinde in den Einlagerungsmedien Steinsalz und Bentonit (Rigide-Plastisch)

Forschungskennzahl (FKZ): 4722B10201



Numerische Modelle zum Deformationsverhalten rigider Körper in einer plastischen Matrix: Abfallgebinde in den Einlagerungsmedien Steinsalz und Bentonit (Rigide-Plastisch)

Dieser Bericht stellt ein Ergebnis wissenschaftlicher Forschung des BASE zum Zeitpunkt der Veröffentlichung dar und entfaltet keine Bindungswirkung für das künftige Handeln des BASE, insbesondere nicht für Entscheidungen im Rahmen von Genehmigungs-, Aufsichts- oder Beteiligungsverfahren.

BASE-013/25

Bitte beziehen Sie sich beim Zitieren dieses Dokumentes immer auf folgende URN:

urn:nbn:de:0221-2025111356657

Berlin, Oktober 2025

Impressum

**Bundesamt
für die Sicherheit
der nuklearen Entsorgung
(BASE)**

BASE - INHOUSE-FORSCHUNGSBERICHTE ZUR
SICHERHEIT DER NUKLEAREN ENTSORGUNG

030 184321-0
www.base.bund.de

Stand: Oktober 2025

GZ: F 3 - BASE - BASE62140/4722B10201

**Numerische Modelle zum
Deformationsverhalten rigider Körper in
einer plastischen Matrix:
Anwendung auf Abfallgebinde in den
Einlagerungsmedien Steinsalz und Bentonit
(Rigide-Plastisch)**

**Carlo Dietl
Carsten Rücker**

Abstract

The presented research project is aimed to simulate with simplistic, generic, numerical 2-D models the linear elastic deformation of waste canisters in a rock salt matrix under hypothetical conditions. It is based on own analogue models (Dietl et al. 2008) and an analytical solution (Mandal und Chakraborty 1990) for the linear elastic deformation behavior of pre- to syntectonic granitoid plutons intruding a schistose orogen. For this purpose, a numerical model consisting of a strong/competent steel or copper canister in a weak/incompetent rock salt matrix was deformed linear elastically in two dimensions under plain strain conditions. During deformation the Young's modulus of the canister materials steel and copper was lowered and the Poisson's ratio raised to simulate mechanical weakening of the canister while the rock salt matrix remained mechanically unchanged. Consequently, at a certain point the canister became weaker than the surrounding rock salt matrix. The canisters were either empty or filled with steel in the modelling case. Our results show clearly, that

- (1) deformation gets more pronounced with progressing mechanical weakening of the canisters,
- (2) a copper canister develops a higher ellipticity than a steel canister under equal strain conditions and equal wall thickness and
- (3) a system consisting of a strong, competent body in a weak, incompetent matrix shows different deformation patterns than a system consisting of a weak, incompetent body in a strong, competent matrix.
 - a. In the first case (strong body in a weak matrix) concave strain and stress trajectories are observed plus material displacement towards the model margins.
 - b. In the second case (incompetent body in competent matrix) material displacement from the model rims towards its center is observed and convex strain and stress trajectories occur.

Our simplistic, generic, numerical 2-D models and the comparison of the numerical results with analogue experiments will help to strengthen our general comprehension of deformation processes in nuclear waste disposal systems and their characterization in numerical models. It should be noted that the selection of parameter combinations was made purely for study purposes in order to generate and observe deformations. This parameter selection does not represent a specific evolution in a repository.

Kurzbeschreibung

Im Rahmen des hier vorgestellten Forschungsvorhabens wurde mit Hilfe einfacher und generischer numerischer 2-D-Modelle das Deformationsverhalten eines Abfallbehälters in einer Steinsalzmatrix unter hypothetischen Annahmen simuliert. Das Projekt basiert auf eigenen Analogmodellen (Dietl et al. 2008) und einer analytischen Lösung (Mandal und Chakraborty 1990) für das linearelastische Deformationsverhalten prä- und syntektonischer Plutone, die ein Orogen mit hohem Tonschieferanteil intrudieren. Es wurden Systeme bestehend aus einem mechanisch starken beziehungsweise kompetenten Behälter (Stahl oder Kupfer) in einer mechanisch schwachen beziehungsweise inkompetenten Matrix (Steinsalz) numerisch abgebildet und unter linearelastischen Bedingungen und bei ebener Deformation („plain strain“) eingeengt. Während der Deformation wurde das E-Modul der Behältermaterialien verringert und das Poissonverhältnis erhöht, bis die Behälter schließlich mechanisch schwächer als die umgebende Steinsalzmatrix wurden. Die mechanischen Eigenschaften der Steinsalzmatrix wurden nicht verändert. Die Behälter wurden in den Modellierungen entweder hohl oder mit einem Stahlkern betrachtet. Die Modellierungsergebnisse zeigen, dass

- (1) die Deformation mit zunehmender mechanischer Schwächung der Behälter zunimmt,
- (2) die Verwendung von Kupfer zu einer größeren Elliptizität des sich deformierenden Körpers führt als die Verwendung von Stahl (bei gleicher Wandstärke und gleichem Strain) und
- (3) ein System aus einem kompetenten Körper in einer inkompetenten Matrix deutlich andere Deformationsmuster entwickelt als ein System aus einem inkompetenten Körper in einer kompetenten Matrix.
 - a. Im ersten Fall (kompetenter Körper in inkompetenter Matrix) werden Materialtransport zu den Rändern des Modells und konkave, nach innen gebogene Strain- und Stresstrajektorien beobachtet.
 - b. Im zweiten Fall (inkompetenter Körper in einer kompetenten Matrix) findet Materialtransport von außen in Richtung des sich deformierenden Körpers statt und es entstehen konvexe, nach außen gebaute Strain- und Stresstrajektorien.

Die Modellierungsergebnisse bilden auch die Bedingungen, unter denen die Experimente durchgeführt wurden, qualitativ korrekt ab.

Die einfachen, numerischen 2-D-Modelle und der Vergleich der numerischen Ergebnisse mit analogen experimentellen Ergebnissen tragen dazu bei, das generelle Verständnis von Deformationsprozessen in Endlagersystemen und den Möglichkeiten ihrer numerischen Beschreibbarkeit zu verbessern. Es wird darauf hingewiesen, dass die Auswahl der Parameterkombinationen ausschließlich zu Studien Zwecken getroffen wurde, um Verformungen zu erzeugen und beobachten zu können. Diese Parameterauswahl stellt keine spezifische Situation oder Entwicklung in einem Endlager dar.

Inhaltsverzeichnis

1	Aufgabenstellung	1
2	Kenntnisstand und Rahmenbedingungen	2
2.1	Analogexperimente	2
2.2	Analytische Lösung.....	3
3	Ergebnisse	4
3.1	Numerisches Nachvollziehen der analytischen Lösung von Mandal und Chakraborty (1990)	4
3.2	Änderungen des E-Moduls und des Poissonverhältnisses bei unterschiedlichen Behälterkonfigurationen	6
3.2.1	<i>Geometrien der einzelnen Modelle</i>	6
3.2.2	<i>Ausgangsbedingungen</i>	7
3.2.3	<i>Modell „strain2 D_2Mat-loop“</i>	9
3.2.4	<i>Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“</i>	12
3.2.5	<i>Modell „strain2 D_3mat-loop-key“</i>	14
3.2.6	<i>Modell „strain2 D_2mat-thin-loop“</i>	17
3.2.7	<i>Modell „strain2 D_3mat-loop-hole“</i>	19
3.2.8	<i>Modell „strain2 D_3mat-copper-hole“</i>	21
3.2.9	<i>Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-steel“</i>	23
3.2.10	<i>Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-loop“</i>	25
3.2.11	<i>Modell „strain2 D_4mat-loop-new“</i>	27
3.2.12	<i>Modell „strain2 D_4mat-thin-loop-new“</i>	29
3.2.13	<i>Modell „strain2 D_3mat-hole-loop-new“</i>	32
3.2.14	<i>Modell „strain2 D_3mat-thin-hole-loop-new“</i>	34
4	Diskussion	36
5	Schlussfolgerungen	40
	Literaturverzeichnis	43
	Abbildungsverzeichnis	45
	Tabellenverzeichnis	47
A	Anhang: Code-Beispiele	48
A. 1	Python-Code für die numerische Umsetzung der analytischen Lösung von Mandal & Chakraborty (1990)	48
A. 2	Python-Code für die numerische Umsetzung der analytischen Lösung von Mandal & Chakraborty (1990) und deren Darstellung (Displacement, Strain, Stress)	49

A. 3	Der allgemeine Python-Code zum Erstellen der Ausgangsgeometrie für die Modelle in Kapitel 3.2	50
A. 4	Python-Code zur Änderung von E-Modul und Poissonverhältnis	50

1 Aufgabenstellung

Das Deformationsverhalten von Systemen aus rigiden (kompetenten) Körpern in einer plastischen (inkompetenten) Matrix ist ein viel diskutierter und studierter strukturgeologischer Prozess auf allen Skalen. Er betrifft kleinmaßstäbliche Systeme wie zum Beispiel Granat-Blasten und -Klasten (Hawemann et al. 2019) bis hin zu großmaßstäblichen Plutonen (Paterson und Tobisch 1988; Paterson et al. 1989; Mandal und Chakraborty 1990).

In den meisten Endlagerkonzepten sollen die Abfallbehälter, die einen rigiden Mantel (zum Beispiel Stahl mit einer korrosionshemmenden Kupferummantelung) besitzen, in eine plastische Matrix eingelagert werden (insbesondere Salzgrus oder Bentonit). Dieses System wird im Laufe der Zeit mechanischen Spannungen ausgesetzt und gegebenenfalls einer Deformation unterworfen sein. Der Behälter ist darüber hinaus Korrosionsprozessen ausgesetzt, die seine Materialeigenschaften verändern können und ihn gegebenenfalls auch rheologisch schwächer werden lassen. Dies gilt insbesondere für Stahl. Kupfer wird generell als korrosionsbeständig angesehen (zum Beispiel Werme et al. 1992; Hall et al. 2021) und zeigt extrem geringe Korrosionsraten unter Endlagerbedingungen (zum Beispiel You et al. 2024; Standish et al. 2016). Da aber auch für Kupfer Korrosionsprozesse beobachtet werden, wurde auch eine rheologische Schwächung von Kupfer in der vorliegenden generischen Studie betrachtet.

Im Rahmen des Projekts wurden linearelastische Aspekte des Langzeitdeformationsverhaltens von kompetenten Körpern wie Abfallbehältern in einer inkompetenten Matrix (im vorliegenden Fall aus Steinsalz) mit Hilfe von numerischen Experimenten und unter Berücksichtigung der langfristig abnehmenden mechanische Stabilität beschrieben. Die numerischen Modelle wurden anhand bereits vorliegender Ergebnisse von Analogmodellen und der mathematisch-analytischen Lösung einer ähnlichen Problemstellung (Mandal und Chakraborty 1990) validiert.

Die hier vorgestellten, einfachen Modelle sind generischer Natur und fokussieren auf einen prinzipiellen Prozess: eine mechanische Schwächung der Behältermaterialien Kupfer und Stahl. Die Ursachen der Schädigungsprozesse werden nicht hergeleitet. Es ist nicht Ziel dieses Projektes, Endlagerprozesse und eine gegebenenfalls daraus resultierende Deformation der Behälter vollständig abzubilden.

2 Kenntnisstand und Rahmenbedingungen

2.1 Analogexperimente

Basis der numerischen Arbeiten sind noch nicht publizierte experimentelle Daten aus Analogmodellen (Dietl et al. 2008), die vom BASE kostenfrei und ohne weitere Verpflichtungen verwendet werden dürfen.

In den Analogexperimenten, die am Hans Ramberg-Tektonik-Laboratorium der Universität Uppsala (Schweden) durchgeführt wurden, wurde eine weiche Plastilinmatrix mit eingearbeiteten rigiden Plastilinzylindern zentrifugiert und gleichzeitig eingeeengt. Ziel der Experimente war es, die Deformation rund um Granitplutone zu simulieren, die vor einem einengenden Deformationsereignis (prädeformativ) – zum Beispiel einer Gebirgsbildung (Orogenese) – in die kontinentale Kruste eingedrungen (intrudiert) sind. Das Zentrifugieren diente lediglich dazu, die Deformation möglichst gleichmäßig über das Modell zu verteilen. Die rheologischen Eigenschaften der verwendeten Analogmaterialien und die zeitlichen Abläufe im Analogexperiment sind nicht nur auf orogene Prozesse anwendbar, sondern auch auf Materialien und Prozesse in einem Endlager. Die vorliegenden Daten aus den Analogexperimenten stellen daher eine wertvolle Grundlage für die vorgeschlagenen numerischen, mechanistischen Modelle für Deformationsprozesse (beziehungsweise Wechselwirkungen zwischen rigiden Abfallgebänden und plastischem Einlagerungsmedium) in einem Endlager dar.

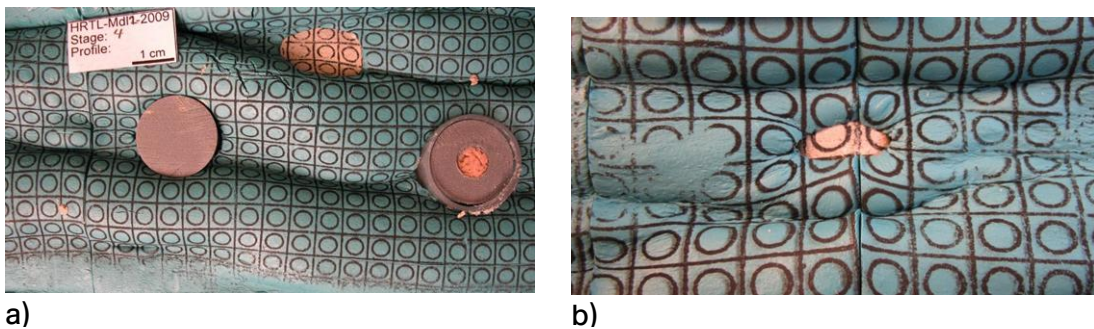


Abbildung 1: Deformationsstrukturen aus den Analogexperimenten. In a) sticht das Faltenmuster hervor. In b) fällt die Trichterstruktur in der Matrix um den rigiden Körper auf. Die Einengung erfolgte parallel zur kurzen Bildkante.

Bei den Analogexperimenten entstanden – in Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Koyi (1988) – rund um die rigiden Körper Mulden- und Sattelstrukturen (Abbildung 1 a). Die bei der Kompression der Modelle entstehenden Falten folgen dabei nur den Faktoren, die für die Geometrie und die Wellenlänge von Falten verantwortlich sind, namentlich der Viskosität der benutzten Materialien und der Schichtdicke (Schmalholz 2006, Hou et al. 2006, Schmalholz und Mancktelow 2016S). Die Faltenstrukturen unmittelbar um die Plastilin- beziehungsweise Hartgummizylinder haben den Charakter von Trichtern (Abbildung 1 b). Ob entsprechende Trichterstrukturen ein generelles Muster in Systemen aus rigiden Körpern

in einer plastischen Matrix sind, ist eine Forschungsfrage, die mit Hilfe der geplanten numerischen Modelle beantwortet werden soll.

2.2 Analytische Lösung

Deformationsmuster in und um einen Pluton, der in ein Gebirge (Orogen) intrudiert, können nach Mandal und Chakraborty (1990) durch eine analytische Lösungsform beschrieben werden. Mandal und Chakraborty (1990) haben dabei zwischen prä-, syn- und postdeformativen Graniten unterschieden. Prädeformative Granite sind vor der Orogenese aufgedrungen, syndeformative Granite haben während der orogenen Einengung Platz genommen und postdeformative Plutone sind nach dem Abklingen der orogenen Deformationsprozesse entstanden. Zum Vergleich mit den Analogexperimenten (Kapitel 2.1) und den numerischen Modellen, die im Mittelpunkt dieses Forschungsprojektes stehen, wurden zwei Spezialfälle von Mandal und Chakraborty (1990) betrachtet: Die Ergebnisse der Analogexperimente wurden mit der analytischen Lösung für prädeformative Plutone verglichen. Außerdem wurde die analytische Lösung eines syndeformativen Plutons, bei dem der Magmendruck fünfmal so hoch ist wie die einengende Spannung während der Orogenese, zur Grundlage der numerischen Modelle (Kapitel 3.1) genommen.

Im Fall des prädeformativen Plutons (Abbildung 2 a) ist das Magma bereits vollständig auskristallisiert und der Pluton verhält sich wie ein rigider Körper – also genauso wie die festen Plastilin- und Hartgummizylinder in den Analogexperimenten, die in Kapitel 2.1 beschrieben werden. Wie bei den Analogexperimenten kann beobachtet werden, dass die Straintrajektorien (die Tangenten an den Langachsen der Strainellipsen) in X_2 -Richtung (siehe Abbildung 2 a) senkrecht zur Einengungsrichtung X_1 auf den rigiden Pluton zulaufen und damit die in den Analogexperimenten beobachteten Trichterstrukturen senkrecht zur Einengungsrichtung nachzeichnen (siehe Abbildung 1 b). In der analytischen Lösung werden die Straintrajektorien in X_1 -Richtung (Einengungsrichtung) um den rigiden Pluton nach außen gebogen. Dieses Phänomen kann man im Analogexperiment nicht beobachten, da die plastische Matrix während der Einengung in der Zentrifuge nach oben ausweichen und ein Faltenmuster entwickeln konnte. Das Ausweichen im Raum und die Faltung verhindern, dass sich im Analogexperiment gebogene Straintrajektorien in Einengungsrichtung bilden können. Wäre die Deformation im Analogexperiment auch auf zwei Dimensionen begrenzt, hätten sich hier ebenfalls entsprechende Muster wie im analytischen Experiment von Mandal und Chakraborty (1990) ausgebildet.

Die analytische Lösung zum syntektonischen Pluton mit dem hohen Magmendruck (Abbildung 2 b) zeigt ebenfalls die Trichterstrukturen senkrecht zur Einengungsrichtung. Auch *in* Einengungsrichtung X_1 bilden sich Trichterstrukturen als auf den Pluton zulaufende Straintrajektorien aus. Ob der hier präsentierte

numerische Ansatz ähnliche Deformationsmuster erzeugt hat, wird in Kapitel 3.1 betrachtet.

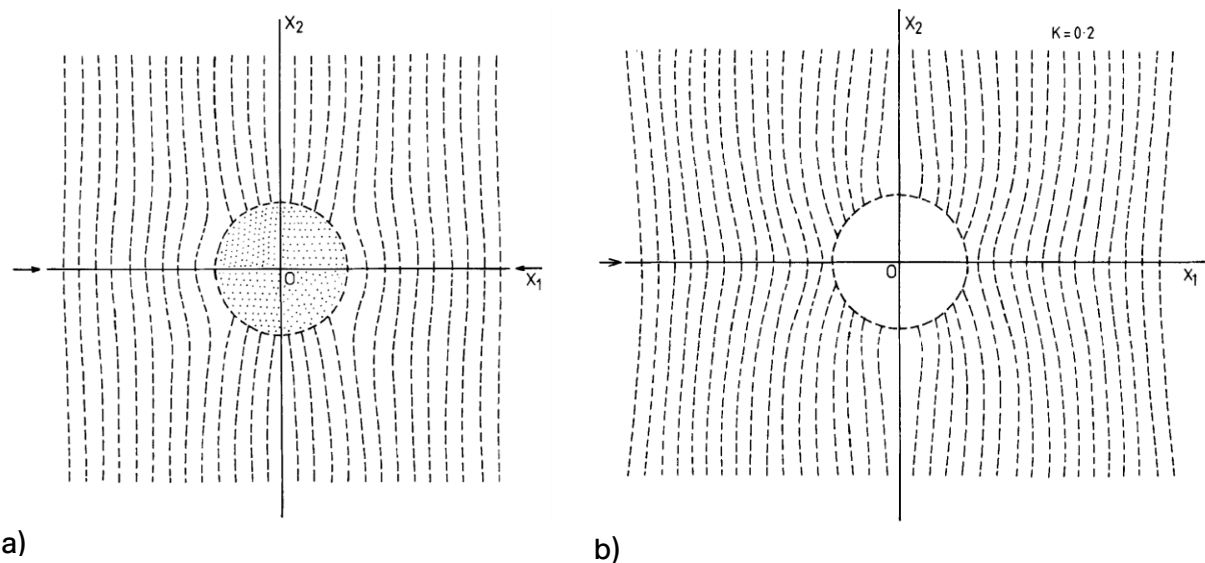


Abbildung 2: Analytische Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) für einen a) prädeformativen Pluton und b) einen syndeformativen Pluton, bei dem der Magmendruck die in X_1 -Richtung einengende orogene Spannung deutlich übersteigt. Gezeigt werden jeweils die Straintrajektorien für die Langachsen der Strainellipsen. Die Straintrajektorien repräsentieren die Tangenten an die Achsen der Strainellipsen (zum Beispiel Ragan 2009).

3 Ergebnisse

3.1 Numerisches Nachvollziehen der analytischen Lösung von Mandal und Chakraborty (1990)

Die analytische Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) wurde im Rahmen dieses Projektes mit einem numerischen Näherungsverfahren, unter Zuhilfenahme der Finite-Elemente-Modellierungstoolbox Oskar, nachvollzogen. Oskar ist eine Inhouse-Softwarelösung des BASE, die im Rahmen des Eigenforschungsprojektes OSTHM entwickelt wurde. Oskar basiert auf pyGIMLi, einer Open-Source-Bibliothek für das Modellieren geophysikalischer Prozesse. Numerisch modelliert wurde der in Kapitel 2.2 beschriebene syntektonische Pluton mit einem internen Magmendruck, der fünfmal so hoch wie der externe tektonische Stress ist. Der hohe Magmendruck wird als hohes E-Modul gerechnet; es ist fünfmal so hoch wie das E-Modul der Matrix. Die numerische Umsetzung der analytischen Lösung findet sich in Anhang A. 1. Die numerischen Ergebnisse, die in Abbildung 3 dargestellt sind, können wie folgt beschrieben werden:

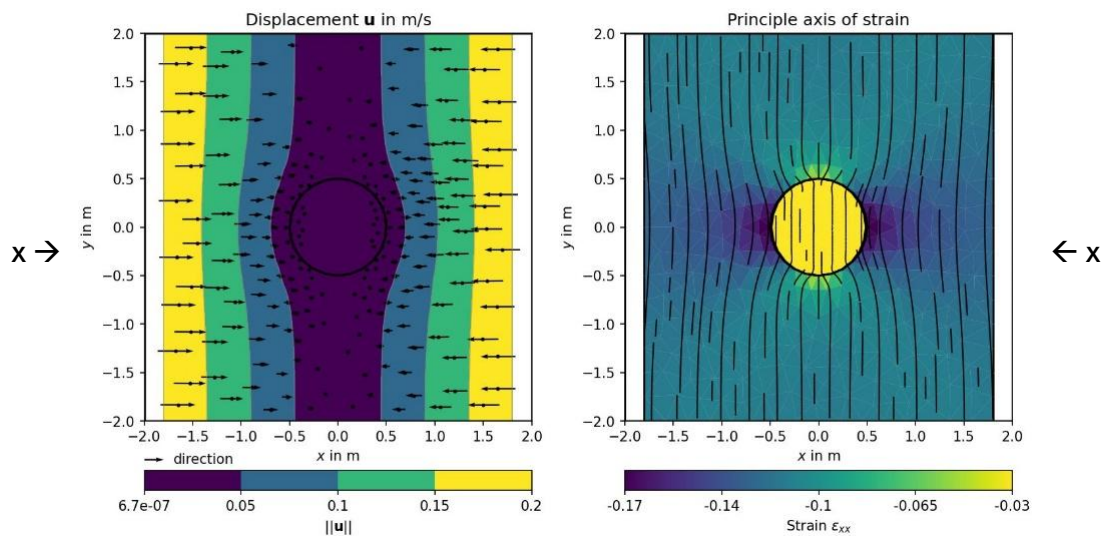
In Abbildung 3 a ist das Displacement, also die reine Materialverlagerung dargestellt. Im vorliegenden Fall ist das Displacement vor allem Translation. Rotation kommt unter den gewählten Bedingungen von reiner Scherung („pure shear“) und ebener Verformung („plain strain“; siehe zum Beispiel auch Ragan 2009) nur

unmittelbar um den zentralen Pluton vor. Dies verdeutlichen auch die Pfeile, die aufgrund der Einengung in x -Richtung eine Materialverlagerung nach innen anzeigen. Die Pfeile zeigen nur die Richtung der Materialverlagerung an und nicht den Betrag. Der Betrag der Materialverlagerung wird durch die Farbzonen in Abbildung 3 a dargestellt. Sie ist im Außenbereich des Modells am stärksten und wird mit Annäherung an den rigiden Kreis im Zentrum schwächer. Rotation spielt nur im unmittelbaren Umfeld des rigiden Kreises (in 3-D wäre es ein Zylinder) in der Modellmitte eine Rolle. Der rigide Kreis übt Widerstand gegen die nach innen gerichteten Kräfte aus. Daher sind die Pfeile hier nach außen rotiert. In Abbildung 3 b wird die Interndeformation (Strain) dargestellt. Im gesamten Modell ist nur Verkürzung realisiert. Entsprechend hat der Strain ein negatives Vorzeichen. Starke Einengung ist durch dunkelblaue Farbe gekennzeichnet. Niedriger einengender Strain ist in Gelb dargestellt. Direkt an der Grenze der plastischen Matrix zum rigiden Kreis (in Einengungsrichtung x) ist der Strain am größten. Der rigide Kreis selbst kann nahezu keinen Strain aufnehmen und erscheint daher hellgrün bis gelb. Das Gleiche gilt für die Matrix im Druckschatten des rigiden Kreises senkrecht zur Einengungsrichtung x . Die Straintrajektorien sind nach innen gerichtet, wo der Strain am größten ist und dort Widerstand ausübt, wo der rigide Kreis wirksam ist.

Der Vergleich von Abbildung 2 b (analytische Lösung von Mandal und Chakraborty 1990 für einen syntektonischen Pluton mit hohem Magmendruck) mit Abbildung 3 b (Strain im numerischen Modell) zeigt, dass die analytische Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) erfolgreich numerisch nachvollzogen werden konnte. In beiden Fällen laufen die Straintrajektorien auf den zentralen Pluton zu.

Im numerischen Modell (Abbildung 3 b) ist erkennbar, dass sich unmittelbar um den rigiden Körper parallel zur x -Achse ein Strainminimum und parallel zur y -Achse des Modells ein Strainmaximum ausbilden. Die Straintrajektorien laufen auf diese beiden Extrema zu. Die analytische Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) und das eigene numerische Modell zeichnen mit diesem Strainmuster auch die im Analogexperiment beobachteten Trichterstrukturen (siehe Abbildung 1 b) nach.

Numerical strainfield for rigid body in elastic medium (Mandal & Chakraborty 1990) with $K=0.2$ and $\varepsilon_{0xx} = -0.1$



a)

b)

Abbildung 3: Erfolgreiche Implementierung der analytischen Lösung für einen syndeformativen Pluton mit hohem Magmendruck von Mandal und Chakraborty (1990) mit dem hauseigenen Code des BASE Oskar. Die Evaluierung der analytischen Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) mit einem numerischen Näherungsverfahren diente als Grundlage für die Berechnung der Deformation einer plastischen Matrix um einen rigiden Körper. a) Materialverschiebung (Displacement), b) Interndeformation in x-Richtung (Strain). Da das Modell klein und nicht sehr rechenintensiv ist, wurde trotz Spiegelsymmetrie die gesamte Modelldomäne diskretisiert und gerechnet. Das in Abbildung 3 b dargestellte Strainmuster gleicht dem von Mandal und Chakraborty (1990) (vergleiche Abbildung 2 b).

3.2 Änderungen des E-Moduls und des Poissonverhältnisses bei unterschiedlichen Behälterkonfigurationen

Basierend auf den Erkenntnissen aus den Analogmodellen (Kapitel 2.1), der analytischen Lösung (Kapitel 2.2) und dem numerischen Nachvollziehen von Mandal und Chakraborty (1990; Kapitel 3.1) wurde mit einem Oskar-Skript das Deformationsverhalten unterschiedlicher Behälterkonfigurationen in einer duktilen Matrix in zwei Dimensionen (im Folgenden: 2-D) gerechnet.

Im Folgenden wird zunächst die generelle Modellgeometrie vorgestellt (Unterkapitel 3.2.1). Anschließend werden die Rand- und Ausgangsbedingungen dargestellt (Unterkapitel 3.2.2). In den darauffolgenden Unterkapiteln werden die zwölf gerechneten Modelle im Detail beschrieben.

3.2.1 Geometrien der einzelnen Modelle

Die beiden einfachsten Modelle bilden entweder einen Stahlvollzylinder oder einen Hohlkörper jeweils in einer Steinsalzmatrix ab. Der Durchmesser der Zylinder (von denen im Folgenden nur der Querschnitt senkrecht zur Zylinderlangachse betrachtet wird, da es sich um 2-D-Modelle handelt) beträgt 0,3 normierte

Längeneinheiten. Das Gesamtmodell erstreckt sich über je 1 Längeneinheit in x- und y-Richtung.

Weitere Modelle bilden Hohl- oder Stahlzylinder ab, die von einer einfachen Kupfer- oder Stahlhülle umgeben sind. Hier hat das Behälterinnere einen Durchmesser von 0,3 und die Wandung entweder eine Dicke von 0,05 („dickwandige Konfiguration“) oder von 0,01 Längeneinheiten („dünnwandige Konfiguration“). Hinzu kommen Modelle mit Behältern aus zusammengesetzten Materialien mit einem Stahlmantel, der von einer Kupferhülle umgeben ist. Bei den Modellen mit Kupfer- und/oder Stahlummantelungen wird ebenfalls zwischen „dickwandigen“ und „dünnwandigen“ Konfigurationen unterschieden. Die dickwandige Variante besteht aus Stahl- und Kupferschichten von je 0,05 Längeneinheiten. Das Behälterinnere hat einen Durchmesser von 0,3 und somit hat der Behälter einen Gesamtdurchmesser von 0,5 Längeneinheiten. Auch die dünnwandigen Behälter mit zusammengesetzten Hüllen haben einen Gesamtdurchmesser von 0,5, allerdings wurde den Kupfer- beziehungsweise Stahlhüllen hier jeweils eine Wanddicke von 0,01 zugemessen, so dass das Behälterinnere einen Durchmesser von 0,46 Längeneinheiten hat.

Das Python-Skript zum Erstellen der Ausgangsgeometrien und ihrer Diskretisierungen (Mesh) für alle verwendeten Modelle findet sich in Anhang A. 3.

3.2.2 Ausgangsbedingungen

In den hier vorgestellten numerischen Modellen soll die Korrosion eines rigidem Körpers beziehungsweise eines Einlagerungsbehälters durch ein sukzessiv verkleinertes E-Modul mit einem korrespondierend zunehmenden Poissonverhältnis abgebildet werden. Eine deutliche Abnahme des E-Moduls von Stahl mit zunehmender Korrosion wird zum Beispiel von Jiang et al. (2020) postuliert. Für das Poissonverhältnis von Stahl kann mit zunehmender Korrosion und Rostbildung eine Zunahme angenommen werden. Laut Richter (1983) ist das Poissonverhältnis von Stahl 0,3. Das Poissonverhältnis von Rost ist 0,49 (Li et al. 2022). Das umgebende Steinsalz wurde in seinen mechanischen Eigenschaften nicht verändert.

Bei den numerischen Modellen dieses Projektes handelt es sich um eine generische und stark vereinfachende Annäherung an Prozesse, die Endlagerbehälter betreffen können. Es war nicht Ziel des hier präsentierten Vorhabens, die Zustände in einem Endlager eins zu eins zu simulieren. Vielmehr war das Ziel der Studie mit der im BASE entwickelten Software Oskar, prinzipielle Prozesse – im vorliegenden Fall die Deformation mechanisch schwächer werdender (zusammengesetzter) rigider Körper (zum Beispiel Endlagerbehälter) – nachzuvollziehen und zu verstehen. Neben dem Prozessverständnis ging es auch darum, zu zeigen, dass der Oskar-Code funktioniert und für die BASE-Forschung angewendet werden kann. Daher wurden für die mechanische Schwächung der Behälter einfache Annahmen getroffen, nämlich die Verringerung der E-Module und die Erhöhung der Poissonverhältnisse der verwendeten Materialien. Um das Verhalten unterschiedlicher

Materialien und zusammengesetzter Behälter zu testen, wurde auch für Kupfer angenommen, dass es mit der Zeit mechanisch schwächer wird, obwohl Kupfer nur schwach korrosiv ist.

Stahl hat als Anfangsbedingung ein E-Modul von 200 GPa und ein Poissonverhältnis ν von 0,3 (Richter 1983). Für Kupfer wurde ein E-Modul von 120 GPa und ein Poissonverhältnis von 0,36 gewählt (Deutsches Kupferinstitut 2005). Für das umgebende Steinsalz wird ein E-Modul von 20 GPa und ein Poissonverhältnis von 0,25 angenommen (basierend auf den verschiedenen gesteinsphysikalischen Daten aus Liu et al. 2017). Im Fall der zusammengesetzten Behälter wurde eine alternative Füllung mit einem E-Modul von 40 GPa und einem Poissonverhältnis von 0,2 benutzt. Beide Werte sind frei gewählt; sie sollten in erster Linie ein Material repräsentieren, das deutlich weicher als Stahl beziehungsweise Kupfer ist, aber gleichzeitig ebenso deutlich von einem Hohlkörper abweicht.

Die fortlaufende Schwächung der Stahl- und Kupferbehälter (und der alternativen Füllung bei den zusammengesetzten Behältern) wurde in insgesamt vier Schritten simuliert. Dabei wurde in einem ersten Schritt das „leicht korrodierte“ Material als dem Ausgangsmaterial noch möglichst ähnlich angenommen. Am Ende von Schritt 4 der Materialschwächung wurden möglichst kleine E-Module für Stahl und/oder Kupfer angenommen (deutlich kleiner als das $E_{\text{Steinsalz}} = 20$ GPa). Gleichzeitig wurde das Poissonverhältnis möglichst nah an den maximal möglichen Wert von $\nu = 0,5$ herangeführt. Für Schritt 1 wurde daher das Ausgangs-E-Modul mit dem Faktor 0,9 und das Ausgangs- ν mit dem Faktor 1,01 multipliziert. Für Schritt 4 betragen die Faktoren 0,01 (E) und 1,3 (ν). Zwischen diesen beiden Endgliedern wurde eine Regression durchgeführt, um die entsprechenden Faktoren zur Erniedrigung von E und zur Erhöhung von ν für die Schritte 2 und 3 zu ermitteln. Die Regressionsformel lautet:

$$\text{Faktor } \nu = -0,3258 * \text{Faktor } E + 1,3033$$

Daraus folgt, dass in Schritt 2 der Faktor der E-Modul-Verringerung 0,5 betrug und der Faktor der Erhöhung des Poissonverhältnisses 1,14. Im Schritt 3 wurde das Ausgangs-E-Modul mit 0,1 multipliziert und das Ausgangs-Poissonverhältnis (ν) mit 1,27. Der entsprechende Python-Code findet sich in Anhang A. 4.

Die Deformation wurde durch Einengung des 2-D-Modells in x-Richtung erreicht. In y-Richtung ist das Modell nicht fixiert, sondern kann sich frei bewegen. Eine Fixierung von oberem und unterem Rand des Modells hätte Auswirkungen auf die beobachteten Deformationsmuster. Die Deformation wurde mit einem linear-elastischen Löser gerechnet. Inelastisches Verhalten oder Kriechverhalten können zurzeit mit Oskar noch nicht gerechnet werden.

Bei den in diesem Vorhaben gerechneten Modellen handelt es sich um generische Modelle mit einer Fokussierung auf wenige Parameter. Zeitabhängige Prozesse spielen keine Rolle (zum Beispiel Kriechprozesse). Sobald es möglich ist,

Kriechprozesse und andere zeit- und ratenabhängige Prozesse mit Oskar zu modellieren, werden diese in die Berechnungen einfließen. Dann werden sich auch Bezüge zu echten Zeitschritten herstellen lassen.

Für alle zwölf gerechneten Modelle (und für jeden der vier Behälterschwächungsschritte) wurden das Displacement (Materialverschiebung), der Strain (elastische Deformation) und der Stress (Spannungsverhältnisse im 2D) graphisch dargestellt. Außerdem wurden die Achsenverhältnisse $\left(\frac{y}{x}\right)$ des elastisch deformierten und ursprünglich kreisförmigen Behälters als Maß für den erfolgten Strain aufgenommen.

Im Folgenden werden die zwölf Modelle im Detail präsentiert.

3.2.3 Modell „strain2 D_2Mat-loop“

Es handelt sich um eines der zwei einfachsten Modelle. Die Materialparameter entsprechen einem Stahlvollzylinder in einer Steinsalzmatrix. In dem vorliegenden 2-D-Modell wird nur der Kreisquerschnitt des Zylinders dargestellt. Die Ausgangsgeometrie inklusive des Gitters stellt sich wie folgt dar (Abbildung 4):

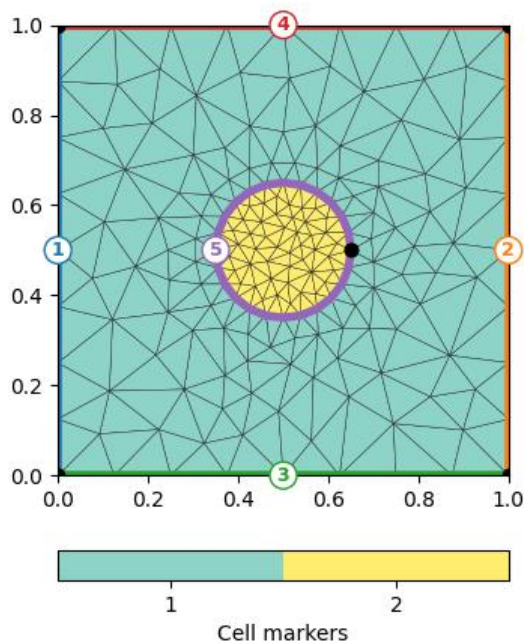


Abbildung 4: Die Ausgangsgeometrie von Modell „strain2 D_2Mat-loop“ mit einem Stahlvollzylinder (in Gelb) in einer Steinsalzmatrix (in Blaugrün). Die unterschiedlich farbigen Linien zeigen die einzelnen Grenzflächen des Modells.

Mit abnehmendem E-Modul und zunehmendem Poissonverhältnis wächst das Verhältnis der y-Achse zur x-Achse. Der Behälter wird in y-Richtung gestreckt beziehungsweise in x-Richtung verkürzt, da das Gesamtmodell in x-Richtung verkürzt wird und in y-Richtung ausweichen kann. Da es sich um elastische Deformation handelt, wird das Modell nach jedem Deformationsschritt auf die Ausgangsbedingungen zurückgesetzt. Schon die Reduktion des E-Moduls von Stahl um den Faktor 0,9 von 200 GPa auf 180 GPa und die Erhöhung des Poissonverhältnisses

von 0,3 auf 0,303 zieht eine merkliche Änderung in der Länge der x - und der y -Achse des Behälters nach sich. So verkürzt sich die x -Achse des Behälters von 0,3 Einheiten auf 0,287, während die y -Achse zunächst unverändert bleibt. Mit der weiteren Abnahme von E und der Zunahme von ν verkürzt sich die x -Achse bis auf einen Wert von 0,249 Einheiten, während sich die entstehende Ellipse in y -Richtung auf eine Länge von 0,309 Einheiten dehnt. Die Achsenverhältnisse finden sich in Tabelle 1.

Tabelle 1: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2D_2Mat-loop“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Stahl}$
Stufe 1	1,038
Stufe 2	1.059
Stufe 3	1.142
Stufe 4	1.242

Displacement sowie Strain- und Stresstrajektorien (Abbildung 5) zeigen für die Materialschwächungsstufen 1 und 2 den gleichen Verlauf wie in dem Modell, das die analytische Lösung nachvollziehen soll (Kapitel 3.1). Das Matrixmaterial wird nach außen verdrängt, während die Straintrajektorien, also die Verbindungslinien zwischen den Langachsen der Strainellipsen, auf den rigiden Behälter zulaufen. Das Gleiche gilt, wenn auch in schwächerem Maße, für die Stresstrajektorien. Dies zeigt, dass die Spannungen im Modell homogen verteilt sind. Erst mit zunehmender Schwächung des Stahlkörpers in Stufe 4 und dem Erreichen eines E -Moduls, das nur noch ein Zehntel des E -Moduls der Salzmatrix beträgt, beulen sich die Strain- und die Stresstrajektorien nach außen. Sie verlaufen dann entlang von Deformations- und Spannungsspitzen an den Seiten der ehemals rigiden Stahlkörper. Gleichzeitig mit dem Verschwinden des Kompetenzkontrastes zwischen der plastischen Matrix (inkompetent) und dem ehemals rigiden Stahlkörper (kompetent) in der Materialschwächungsstufe 4 wird Material (sowohl Salzmatrix als auch der weiche Stahl) nach innen verlagert (Abbildung 5).

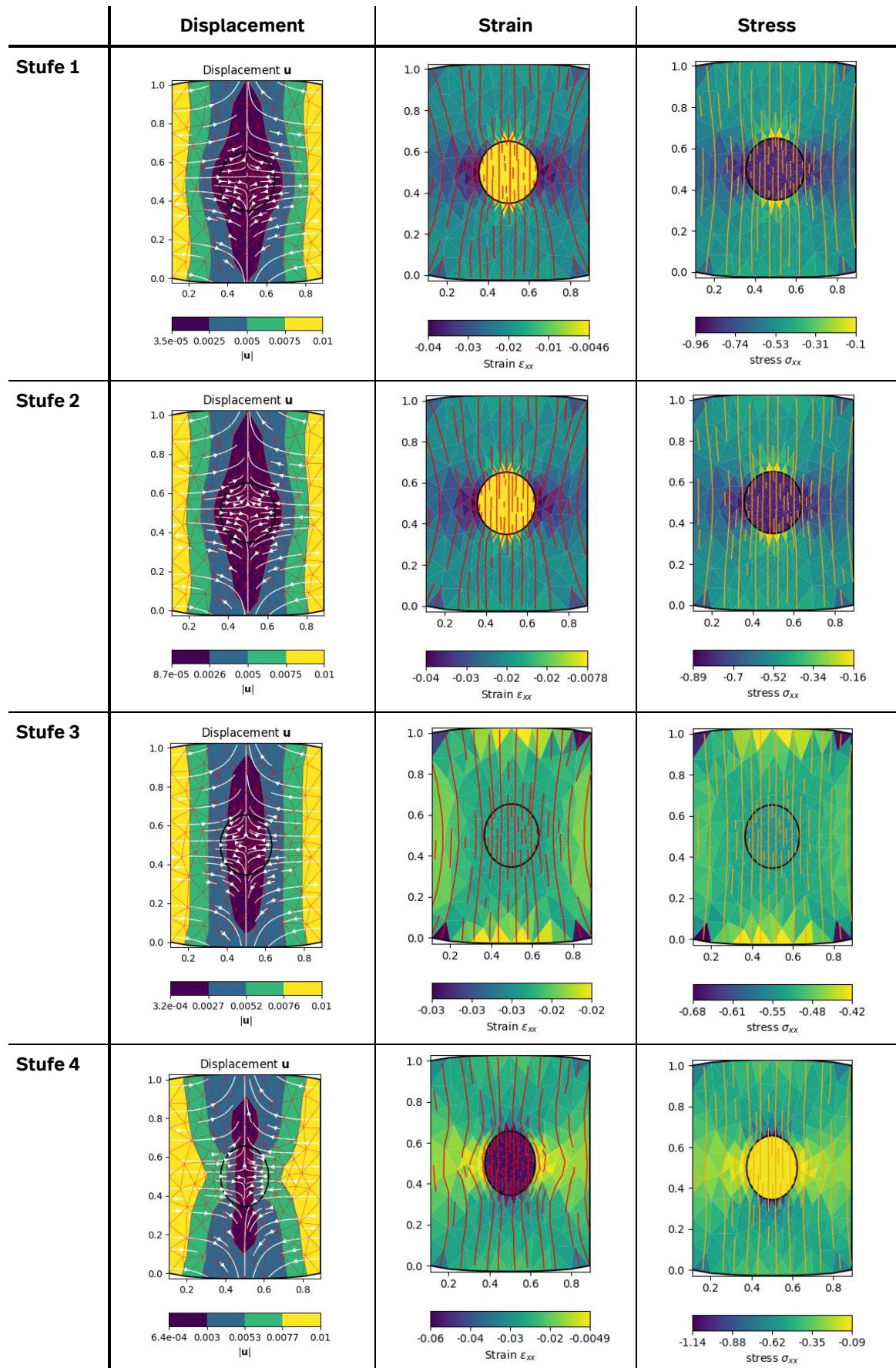


Abbildung 5: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_2Mat-loop“.

3.2.4 Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“

Das Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“ beinhaltet einen Hohlzylinder in einer Steinsalzmatrix. Es ist das zweite sehr einfache Modell. Es gibt keine Stahl- oder Kupferhülle um den Hohlkörper. Mit diesem Modell wird getestet, wie sich in Oskar eine Hohlform im 2-D bei seitlicher Einengung verhält. Eine Analogie zu einer Endlagersituation gibt es in diesem Modell nicht. Gerechnet wird – wie auch bei allen anderen Modellen – der Kreisschnitt des zylindrischen Behälters senkrecht zu seiner Langachse im 2-D. Die Ausgangsgeometrie inklusive des Gitters stellt sich wie folgt dar (Abbildung 6):

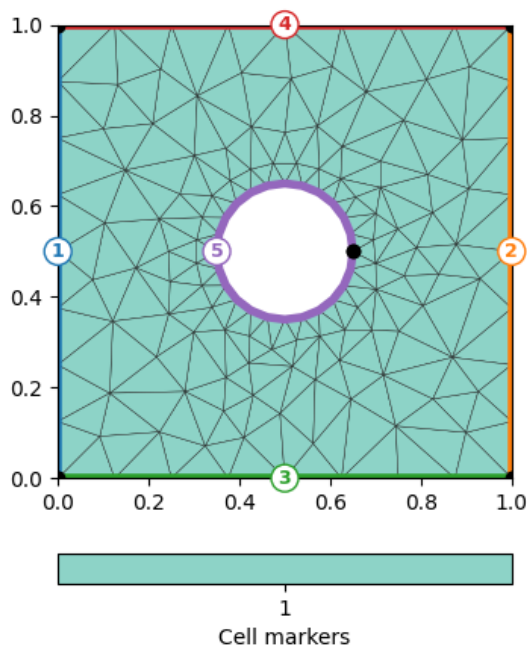


Abbildung 6: Die Ausgangsgeometrie von Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“ mit einem kreisförmigen Loch (Kreisschnitt des Hohlzylinders; farblos/weiß) in einer Steinsalzmatrix (blaugrün).

Da das Modell aus einem kreisförmigen Loch – ohne jede Steifigkeit – in der Steinsalzmatrix besteht, ist die Gesamtdeformation schon bei Stufe 1 erreicht. Die x-Achse des Hohlkreises wurde von einer Ausgangslänge von 0,3 Einheiten auf 0,113 Einheiten verkürzt, während die Länge der y-Achse von 0,3 Einheiten auf 0,353 Einheiten gestreckt wurde. Das Achsenverhältnis $\left(\frac{y}{x}\right)$ beträgt für alle Stufen 2,649 (siehe Tabelle 2).

Tabelle 2: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{hohl}}$
Stufe 1	2,649
Stufe 2	2,649
Stufe 3	2,649
Stufe 4	2,649

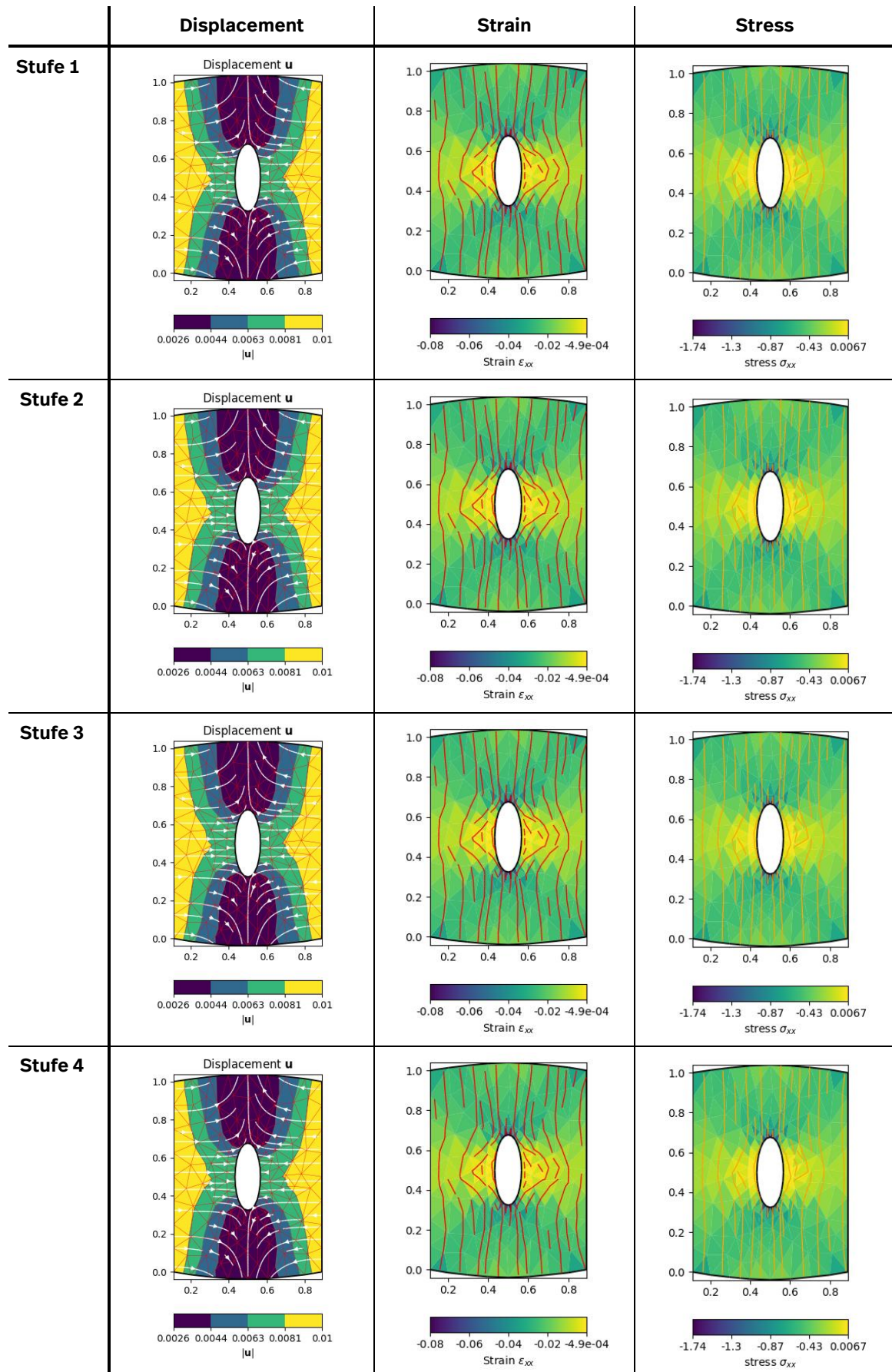


Abbildung 7: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2_D_2Mat-hole-loop“.

Die Displacement-, Strain- und Stressmuster (Abbildung 7) sind für alle Stufen gleich. Es findet Materialverlagerung nach innen in Richtung des Hohlräum

Tabelle 3: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_3mat-loop-key“

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Kupfer}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Stahl}$
Stufe 1	1,053	1,042
Stufe 2	1,079	1,065
Stufe 3	1,166	1,140
Stufe 4	1,250	1,214

Der Displacement-, Strain- und Stress-Verlauf über die vier Materialschwächungsstufen gleicht ebenfalls dem in „strain2 D_2Mat-loop“ beobachteten Verlauf (vergleiche Abbildung 9 mit Abbildung 5).

Materialverlagerung nach innen und ein Ausbeulen der Strain- und Stresstrajektorien finden erst in Stufe 4 mit Unterschreiten des E-Moduls der Steinsalzmatrix (bei gleichzeitiger Überschreitung von $v_{Steinsatz}$) durch die Behältermaterialien statt.

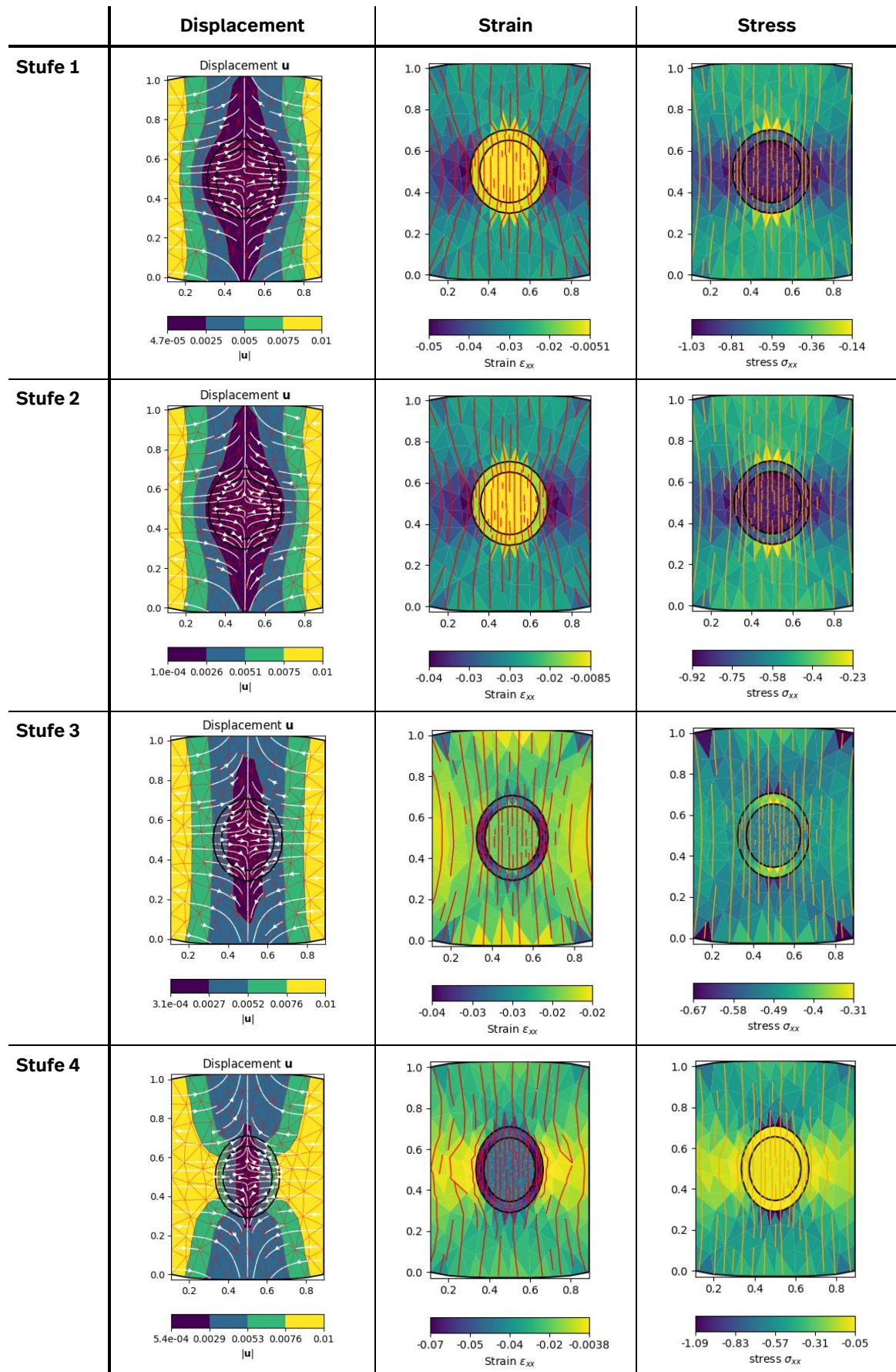


Abbildung 9: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen von Modell „strain2 D_3mat-loop-key“.

3.2.6 Modell „strain2 D_2mat-thin-loop“

Das Modell ist im Prinzip genauso aufgebaut wie das Modell „strain2 D_3mat-loop-key“, allerdings in der dünnwandigen Konfiguration mit einem Kupfermantel mit einer Wandstärke von 0,01 Einheiten Dicke und einem Stahlkern mit einem Durchmesser von 0,38 Einheiten (Abbildung 10). Beide Materialien werden über die vier Deformationsstufen weicher, das heißt, die E-Module werden kleiner und die Poissonverhältnisse größer.

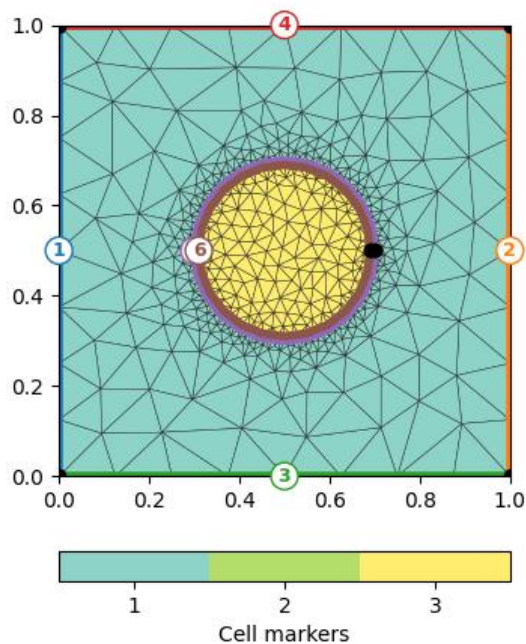


Abbildung 10: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_2mat-thin-loop“ mit einem Stahlvollzylinder mit dünnem Kupfermantel in einer Steinsalzmatrix.

Die Achsenverhältnisse (Tabelle 4) entwickeln sich wie im dickwandigen Vergleichsmodell „strain2 D_3mat-loop-key“ (siehe Tabelle 3); dies gilt insbesondere für den Kupfermantel. Der Einfluss der Wanddicke spielt eine untergeordnete Rolle. Allerdings ist die Dehnung des Stahlkerns in y -Richtung im dünnwandigen Modell deutlich ausgeprägter als im dickwandigen Modell. Die Displacement-, Strain- und Stressmuster (Abbildung 11) gleichen denen des dickwandigen Gegenstücks im Vergleichsmodell „strain2 D_3mat-loop-key“ (Abbildung 9).

Tabelle 4: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_2mat-thin-loop“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Kupfer}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Stahl}$
Stufe 1	1,058	1.067
Stufe 2	1,082	1,090
Stufe 3	1,166	1,173
Stufe 4	1,252	1,257

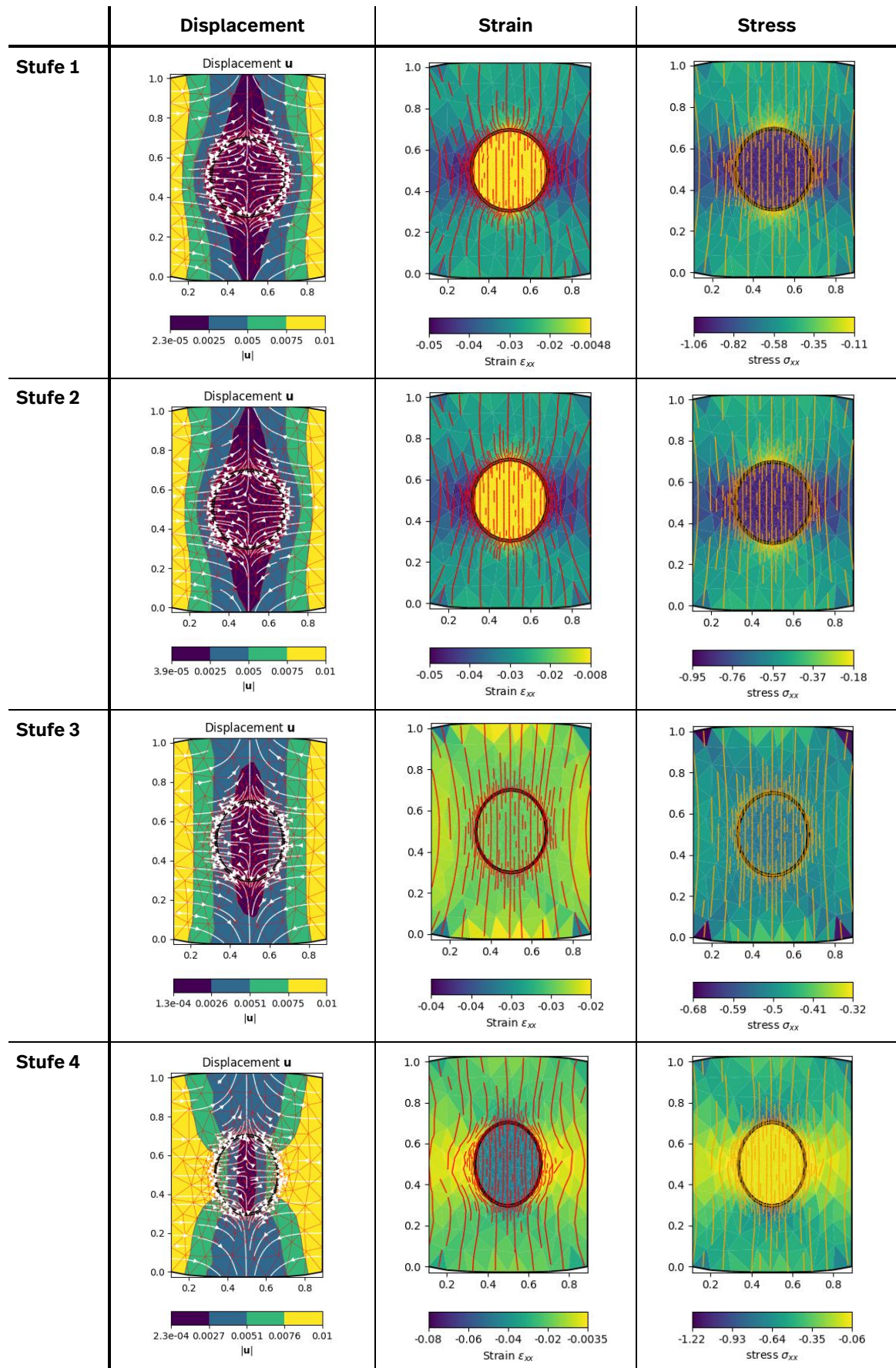


Abbildung 11: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_2mat-thin-loop“.

3.2.7 Modell „strain2 D_3mat-loop-hole“

Im Modell „strain2 D_3mat-loop-hole“ wurde der Stahlvollzylinder im Kern des Behälters durch einen Hohlkörper ersetzt, der von einem Stahlmantel umgeben ist. Die Ausgangsgeometrie inklusive des Gitters ist in Abbildung 12 dargestellt.

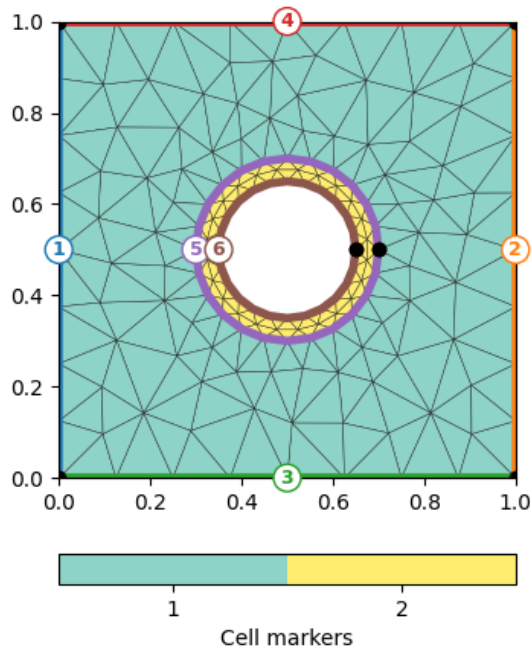


Abbildung 12: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_3mat-loop-hole“ mit einem Hohlzylinder mit Stahlmantel in einer Steinsalzmatrix.

Hinsichtlich des Deformationsverlaufes ergibt sich ein ähnliches Bild wie im Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“ (Kapitel 3.2.4). Die Hohlform im Inneren des Behälters bestimmt die Displacement-, Strain- und Stresspfade in der Matrix (Abbildung 13): Von Materialschwächungsstufe 1 an wird Matrixmaterial nach innen verlagert und die Strain- und Stresstrajektorien sind nach außen gebeult. Allerdings puffert der Stahlmantel die Deformation ab, so dass die Achsenverhältnisse $\left(\frac{y}{x}\right)$ über die Deformationsstufen hinweg wachsen können und nicht schon in Stufe 1 (wie im Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“) ihr Endmaß erreichen. Die Achsenverhältnisse vom Modell „strain2 D_3mat-loop-hole“ finden sich in Tabelle 5.

Tabelle 5: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_3mat-loop-hole“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Stahl}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{hohl}$
Stufe 1	1,588	1,944
Stufe 2	1,643	2,039
Stufe 3	1,734	2,196
Stufe 4	1,778	2,269

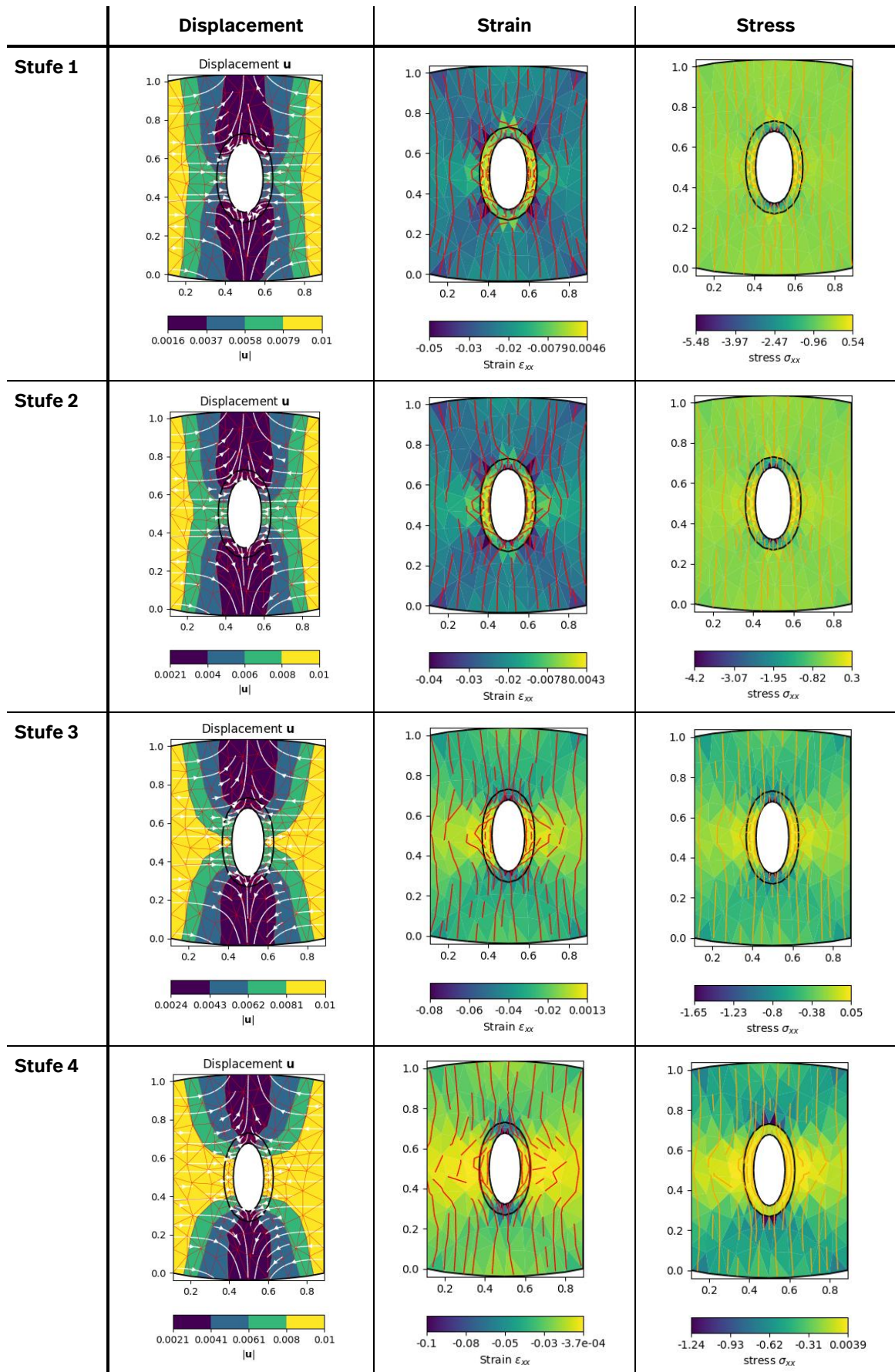


Abbildung 13: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_3mat-loop-hole“.

3.2.8 Modell „strain2 D_3mat-copper-hole“

Wird der dicke Stahlmantel aus dem Vorgängermodell „strain2 D_3mat-loop-hole“ durch einen von Beginn an weicheren Kupfermantel ersetzt (E_{Stahl} : 200 GPa, E_{Kupfer} : 120 GPa), ändern sich weder die Ausgangsgeometrie des Modells (Abbildung 14) noch die Displacement-, die Strain- oder die Stressmuster (vergleiche Abbildung 15 mit Abbildung 13).

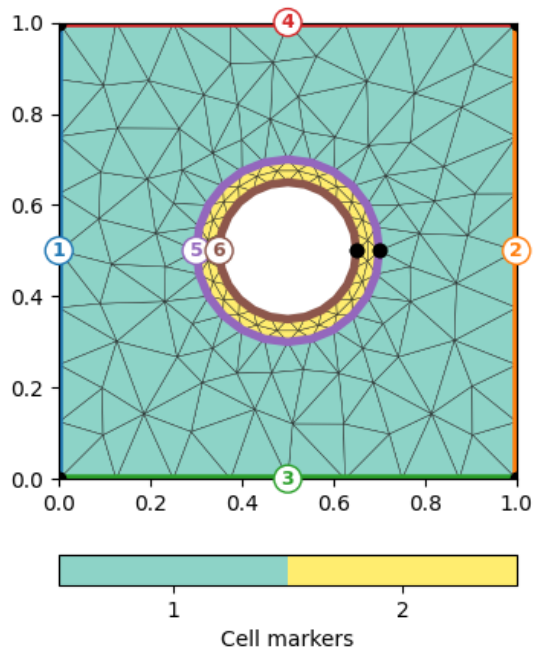


Abbildung 14: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_3mat-copper-hole“ mit einem Hohlzylinder mit Kupfermantel in einer Steinsalzmatrix.

Allerdings vergrößern sich die Verhältnisse zwischen Lang- und Kurzachse der Behälterellipse, was an der von Anfang an geringeren Steifigkeit des Kupfers im Vergleich zum Stahl liegt (vergleiche Tabelle 6 mit Tabelle 5). Das maximale Achsenverhältnis von 2,649 aus dem Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“ (Kapitel 3.2.4) wird nicht erreicht.

Tabelle 6: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_3mat-copper-hole“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{Kupfer}}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{hohl}}$
Stufe 1	1,684	2,109
Stufe 2	1,734	2,195
Stufe 3	1,822	2,339
Stufe 4	1,860	2,399

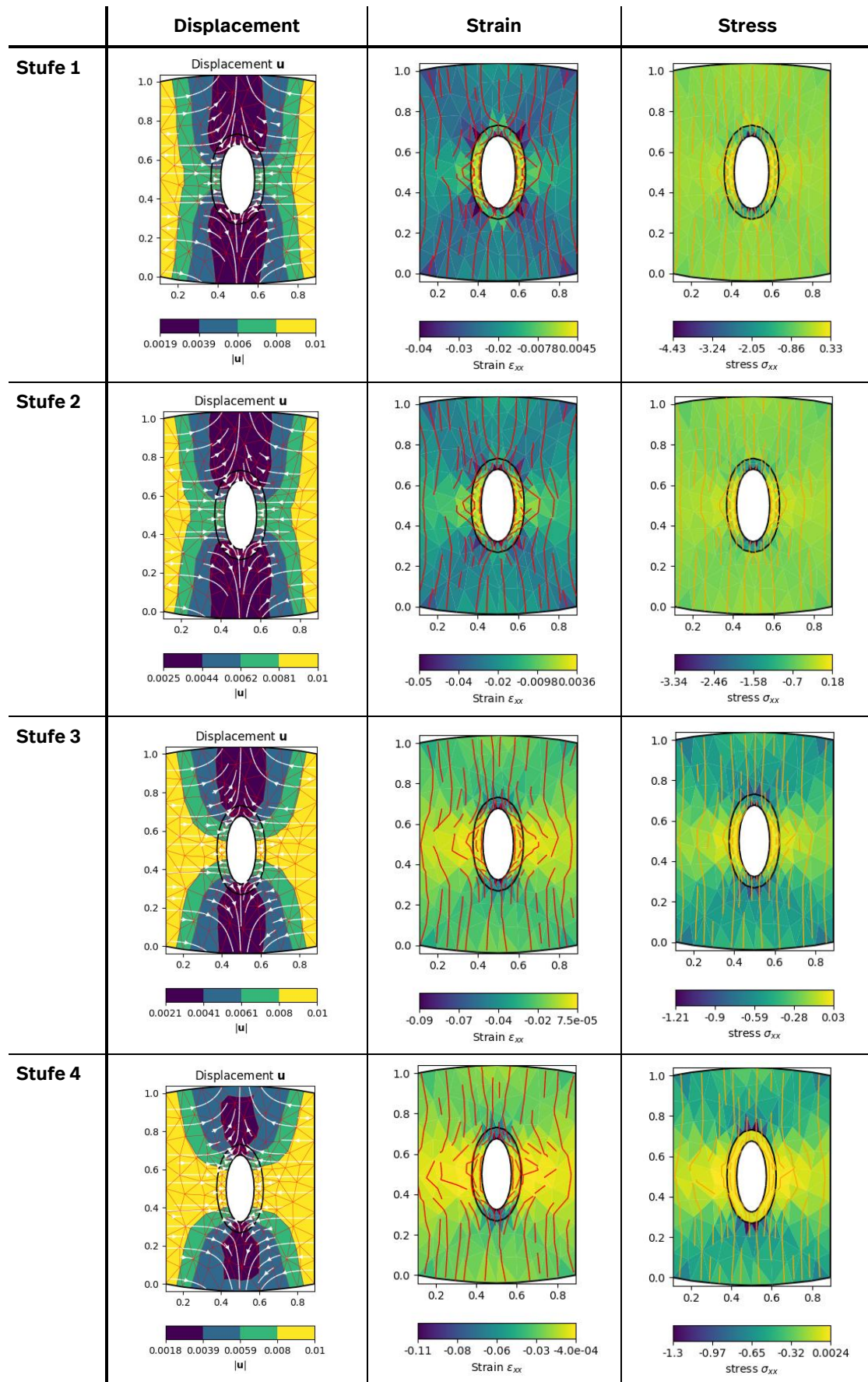


Abbildung 15: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2_D_3mat-copper-hole“.

3.2.9 Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-steel“

Auch ein Wechsel in der Dickenkonfiguration von „dickwandig“ zu „dünnwandig“ bei Verwendung eines dünnen Stahlmantels (Ausgangsgeometrie und Gitter in Abbildung 16) ändert nichts am beobachteten Displacement-, Strain- und Stressmuster (siehe Abbildung 17). Nur die Achsenverhältnisse wachsen weiter (Tabelle 7), erreichen aber nicht den im Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“ (Kapitel 3.2.4) erreichten Höchstwert. Insgesamt ändern sich die Achsenverhältnisse von Stufe 1 zu Stufe 4 nur marginal.

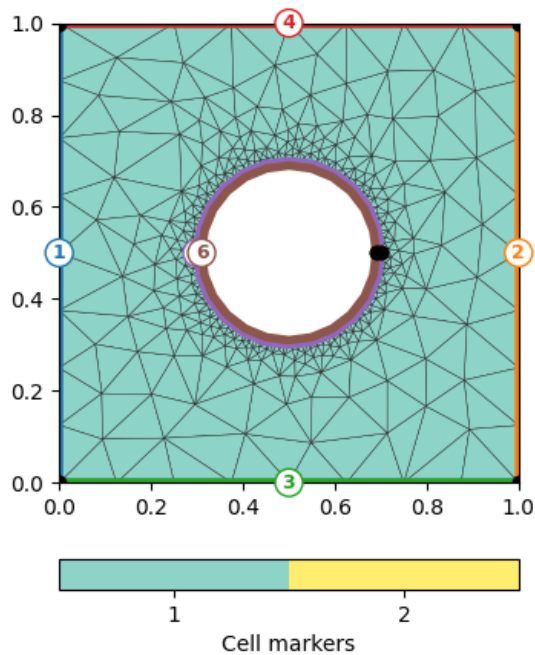


Abbildung 16: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-steel“ mit einem Hohlzylinder mit dünnem Stahlmantel in einer Steinsalzmatrix.

Tabelle 7: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-steel“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Stahl}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{hohl}$
Stufe 1	2,221	2,353
Stufe 2	2,230	2,361
Stufe 3	2,249	2,377
Stufe 4	2,257	2,384

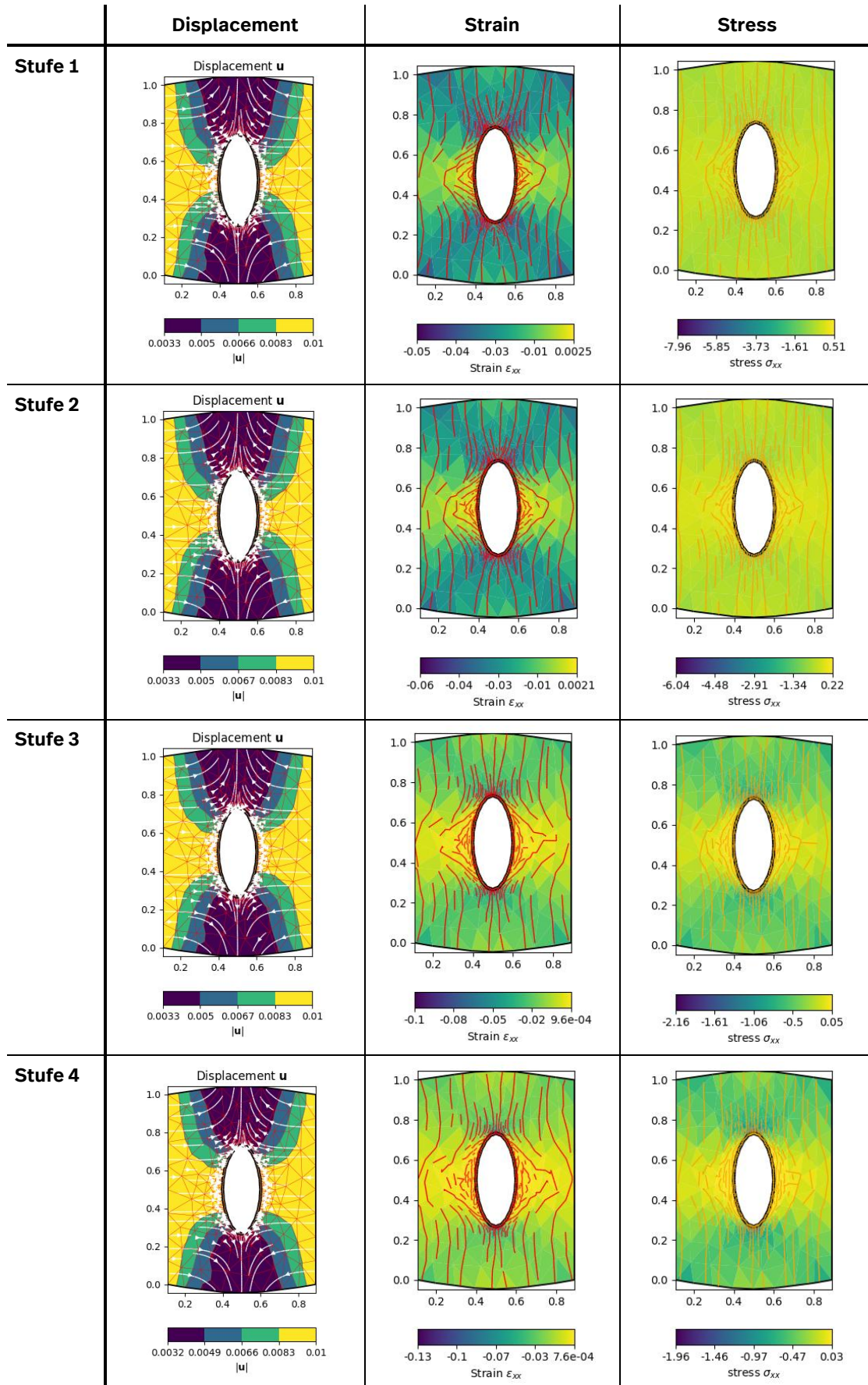


Abbildung 17: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-steel“.

3.2.10 Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-loop“

Die Ausgangsgeometrie (dünnwandige Behälterkonfiguration um Hohlzylinder) ändert sich im Vergleich zum Vorgängermodell „strain2 D_2mat-thin-hole-steel“ (Kapitel 3.2.9) nicht (siehe Abbildung 18). Allerdings wird der dünne Stahlmantel durch einen dünnen Kupfermantel ersetzt, der beim Durchlaufen der vier Deformationsschritte schwächer wird und an Steifigkeit verliert.

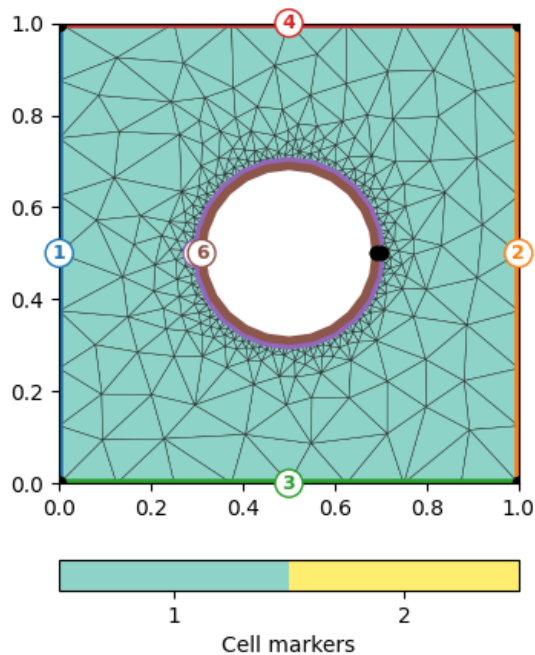


Abbildung 18: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-loop“ mit einem Hohlzylinder mit dünnem Kupfermantel in einer Steinsalzmatrix.

Die Änderung des Mantelmaterials macht sich in einem weiteren Wachstum der Achsenverhältnisse bemerkbar (Tabelle 8). Auch bei dieser dünnwandigen Konfiguration ändern sich die Achsenverhältnisse deutlich weniger als bei den dickwandigen Modellkonfigurationen. Die Hohlform im Inneren des Behälters hat ein $\left(\frac{y}{x}\right)$ -Verhältnis von 2,397 – es ist das höchste außerhalb von Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“ (Kapitel 3.2.4) beobachtete Achsenverhältnis für eine der deformierten Ellipsen. Die Displacement-, Strain- und Stressmuster ändern sich im Vergleich zu Modell strain2 D_2mat-thin-hole-steel nicht (Abbildung 19).

Tabelle 8: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-loop“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{Kupfer}}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{hohl}}$
Stufe 1	2,239	2,369
Stufe 2	2,250	2,378
Stufe 3	2,269	2,392
Stufe 4	2,276	2,397

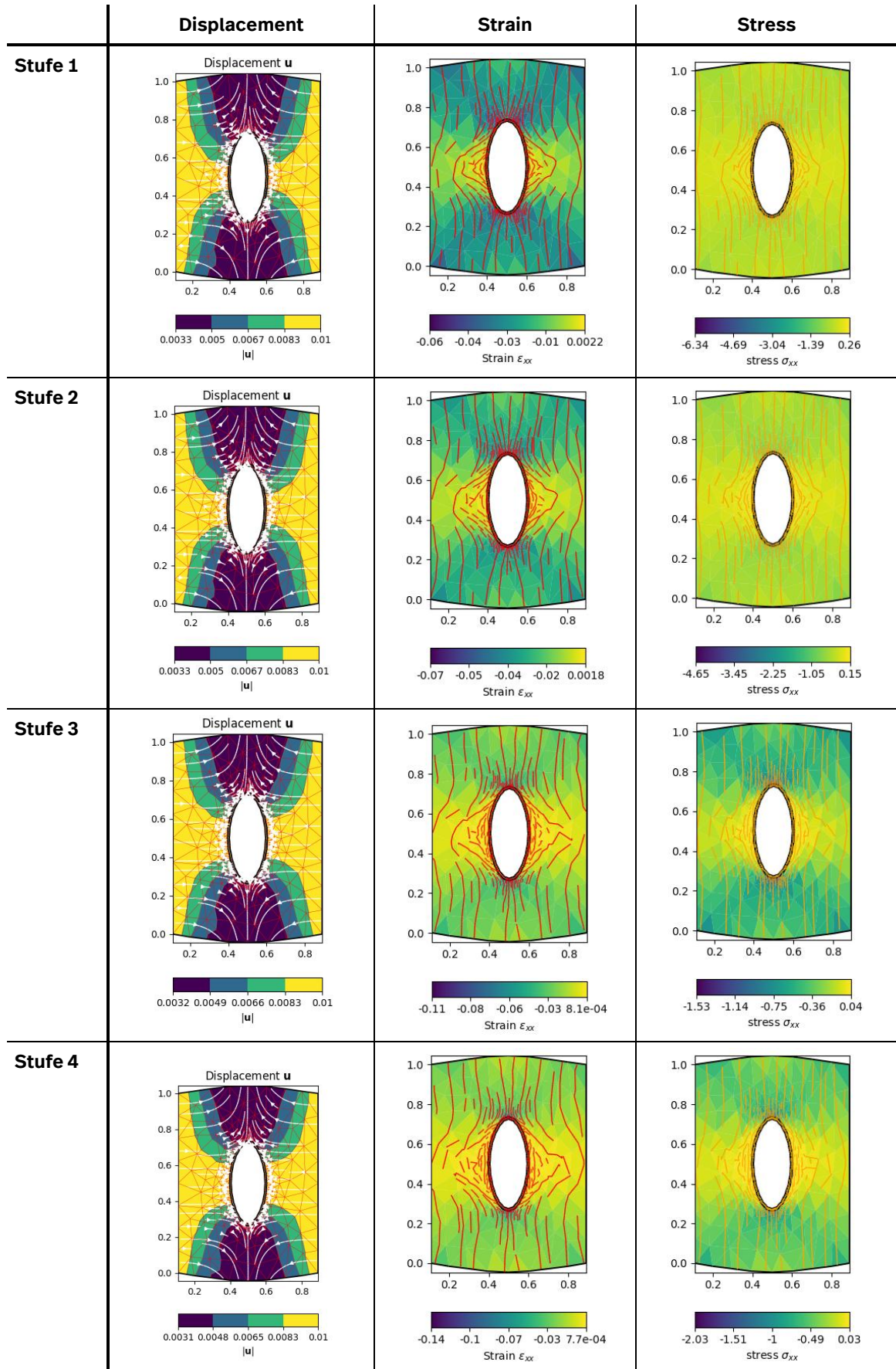


Abbildung 19: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-loop“.

3.2.11 Modell „strain2 D_4mat-loop-new“

Die letzte Modellserie beschreibt Modelle mit Kupfer-Stahl-Mänteln um einen Vollzylinder mit alternativer Füllung beziehungsweise einer Hohlform im Zentrum (siehe auch die generelle Konfigurationsbeschreibung in den Kapiteln 3.2.1 und 3.2.2). Es wurden sowohl dick- als auch dünnwandige Behälterkonfigurationen getestet.

Das erste Modell dieser Serie beschreibt einen dickwandigen zusammengesetzten Behälter mit alternativer Füllung (Ausgangs-E: 40 GPa, Ausgangs- ν : 0,20). Die einzige Maßgabe für die Materialeigenschaften der „alternativen Füllung“ war, dass E und ν von den entsprechenden Werten für Kupfer und Stahl abweichen, aber auch nicht zu nahe an den „0“-Werten der Hohlform liegen sollten. Alle drei Materialien werden über die Zeit weicher. Die Ausgangsgeometrie inklusive des Gitters stellt sich wie folgt dar (Abbildung 20):

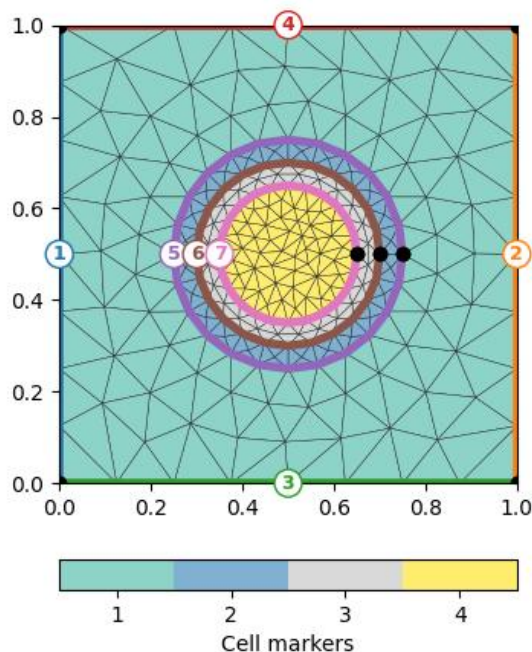


Abbildung 20: Die Ausgangsgeometrie von Modell „strain2 D_4mat-loop-new“ mit einem Vollzylinder mit Kupfer- und Stahlmantel (in Blau beziehungsweise Grau) in einer Steinsalzmatrix (grün); die Füllung des Zylinders (in Gelb) ist separat spezifiziert ($E = 40 \text{ GPa}$, $\nu = 0,20$).

Die Achsenverhältnisse für alle drei Materialien nehmen von einer Materialschwächungsstufe zur nächsten zu (Tabelle 9).

Tabelle 9: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_4mat-loop-new“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{Kupfer}}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{Stahl}}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{Füllung}}$
Stufe 1	1,160	1,188	1,211
Stufe 2	1,204	1,239	1,275
Stufe 3	1,311	1,362	1,431
Stufe 4	1,366	1,424	1,515

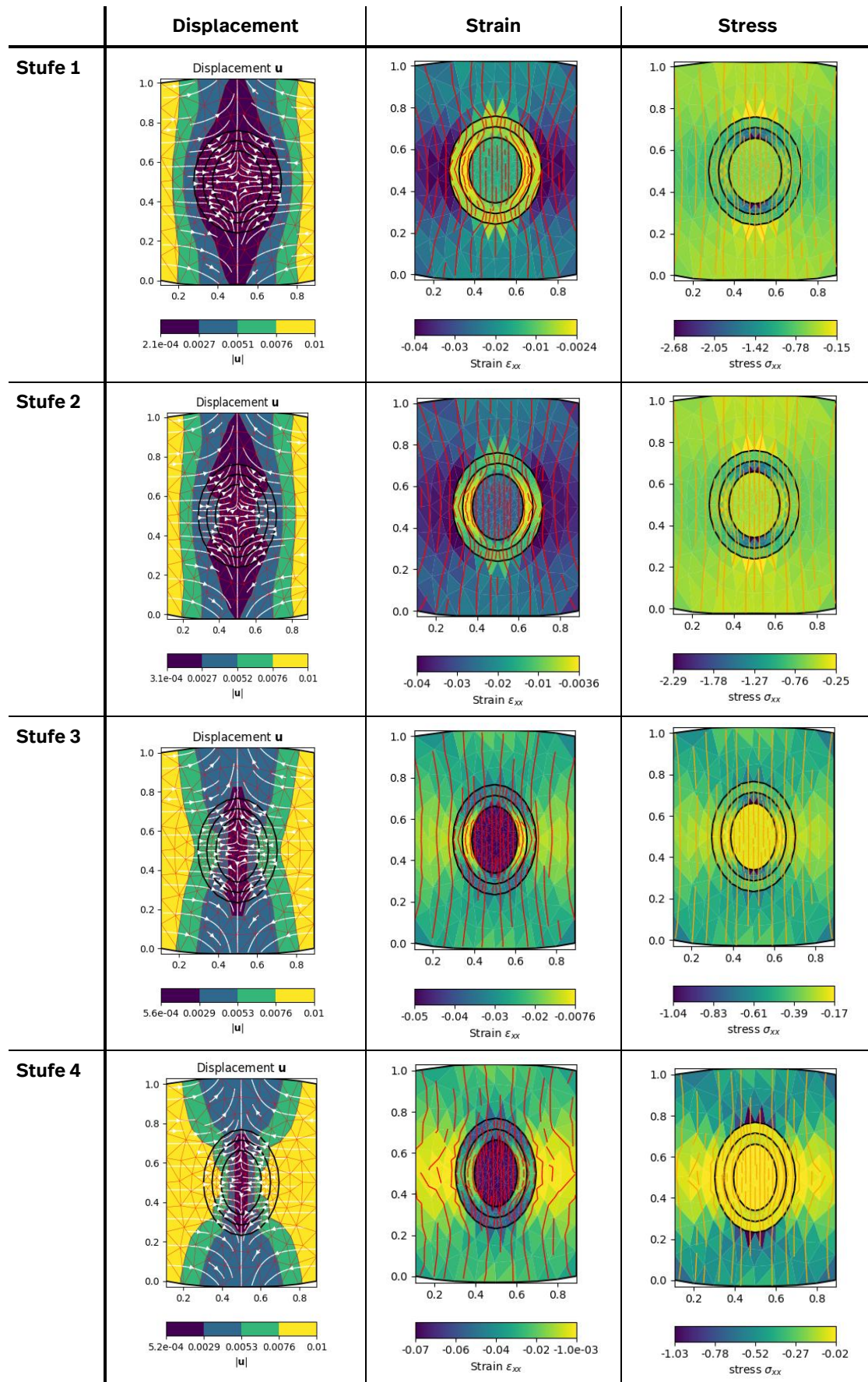


Abbildung 21: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_4mat-loop-new“.

Ein deutlicher Sprung in den Werten kann von Stufe 2 zu Stufe 3 beobachtet werden, wenn die E-Module für alle drei betrachteten Materialien und Strukturelemente (Kupfermantel, Stahlmantel und alternative Füllung) unter den E-Modul von Steinsalz fallen. Wachsen die Achsenverhältnisse von Stufe 1 zu Stufe 2 um 4 bis 5 Prozent, so vergrößern sie sich von Stufe 2 nach 3 um 9 bis 12 Prozent. Von Stufe 3 nach 4 wachsen die Achsenverhältnisse dann wieder im Schnitt um nur 4 Prozent. In den sich ändernden Achsenverhältnissen spiegelt sich auch die Zunahme des Poissonverhältnisses mit jeder der vier Materialschwächungsstufen wieder.

Der Sprung in den Achsenverhältnissen wird begleitet von klaren Veränderungen in den Displacement-, den Strain- und den Stressmustern (Abbildung 21), wie sie zu erwarten sind, wenn der zentrale Körper schwach beziehungsweise von einem Hohlkörper gebildet wird. Dann bewegt sich Matrixmaterial von außen nach innen und die zuvor nach innen, also dem Behälter zugewandten Strain- und Stresstrajektorien werden nach außen ausgebeult. Das Modell „strain2 D_4mat-loop-new“ bestätigt damit die auch zuvor bei den anderen Modellen gemachten Beobachtungen.

3.2.12 Modell „strain2 D_4mat-thin-loop-new“

Dieses Modell unterscheidet sich vom Vorgängermodell „strain2 D_4mat-loop-new“ (Kapitel 3.2.12) durch die dünnwandige Behälterkonfiguration: Kupfer- und Stahlmantel sind je 0,1 Einheiten dick (im dickwandigen Modell „strain2 D_4mat-loop-new“ sind es je 0,5 Einheiten). Das Behälterinnere hat einen Durchmesser von 0,46 Längeneinheiten (in der dickwandigen Modelvariante sind es 0,3 Längeneinheiten). Die Ausgangsgeometrie inklusive des Gitters zeigt Abbildung 22.

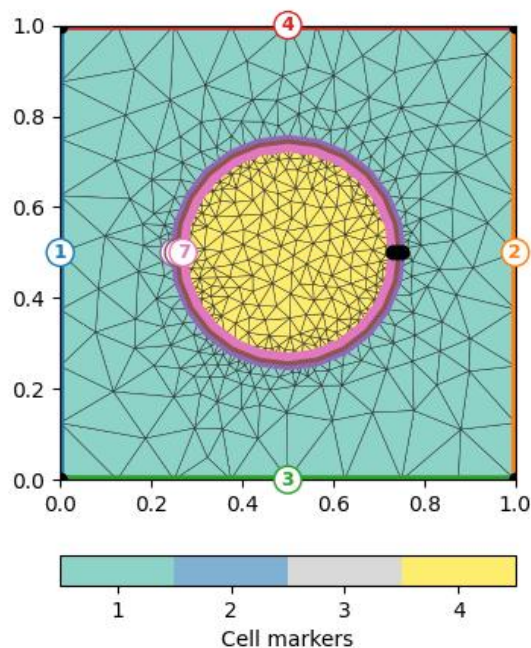


Abbildung 22: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_4mat-thin-loop-new“ mit einem Vollzylinder mit Kupfer- und Stahlmantel in einer Steinsalmatrix (grün); die alternative Füllung des Zylinders (gelb) ist extra spezifiziert ($E = 40 \text{ GPa}$, $\nu = 0,20$).

Die Entwicklung der Achsenverhältnisse folgt dem bereits im Modell „strain2 D_4mat-loop-new“ beobachteten Muster (siehe Tabelle 10). Bis zur Abnahme der E-Module der Behältermaterialien unter den Schwellenwert 20 GPa ($E_{\text{Steinsalz}}$) nehmen die Achsenverhältnisse aller drei Strukturelemente – Kupferring, Stahlring und alternative Füllung – moderat um weniger als 5 Prozent zu. Mit dem Unterschreiten von $E_{\text{Steinsalz}}$ wachsen die Achsenverhältnisse um bis zu 10 Prozent, um dann von Stufe 3 zu Stufe 4 wieder auf eine Wachstumsrate von nur noch 4 Prozent zu sinken. In den sich ändernden Achsenverhältnissen spiegelt sich auch die Zunahme des Poissonverhältnisses mit jeder der vier Materialschwächungsstufen wider.

Tabelle 10: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_4mat-thin-loop-new“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{Kupfer}}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{Stahl}}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{\text{Füllung}}$
Stufe 1	1,235	1,241	1,244
Stufe 2	1,290	1,298	1,303
Stufe 3	1,408	1,419	1,427
Stufe 4	1,461	1,473	1,483

Die Displacement-, die Strain- und die Stressmuster (Abbildung 23) folgen dem bereits bekannten Verhalten, wonach mit dem Unterschreiten von $E_{\text{Steinsalz}}$ die Materialbewegung nach innen und das Ausbeulen von Strain- und Stresstrajektorien nach außen einsetzen.

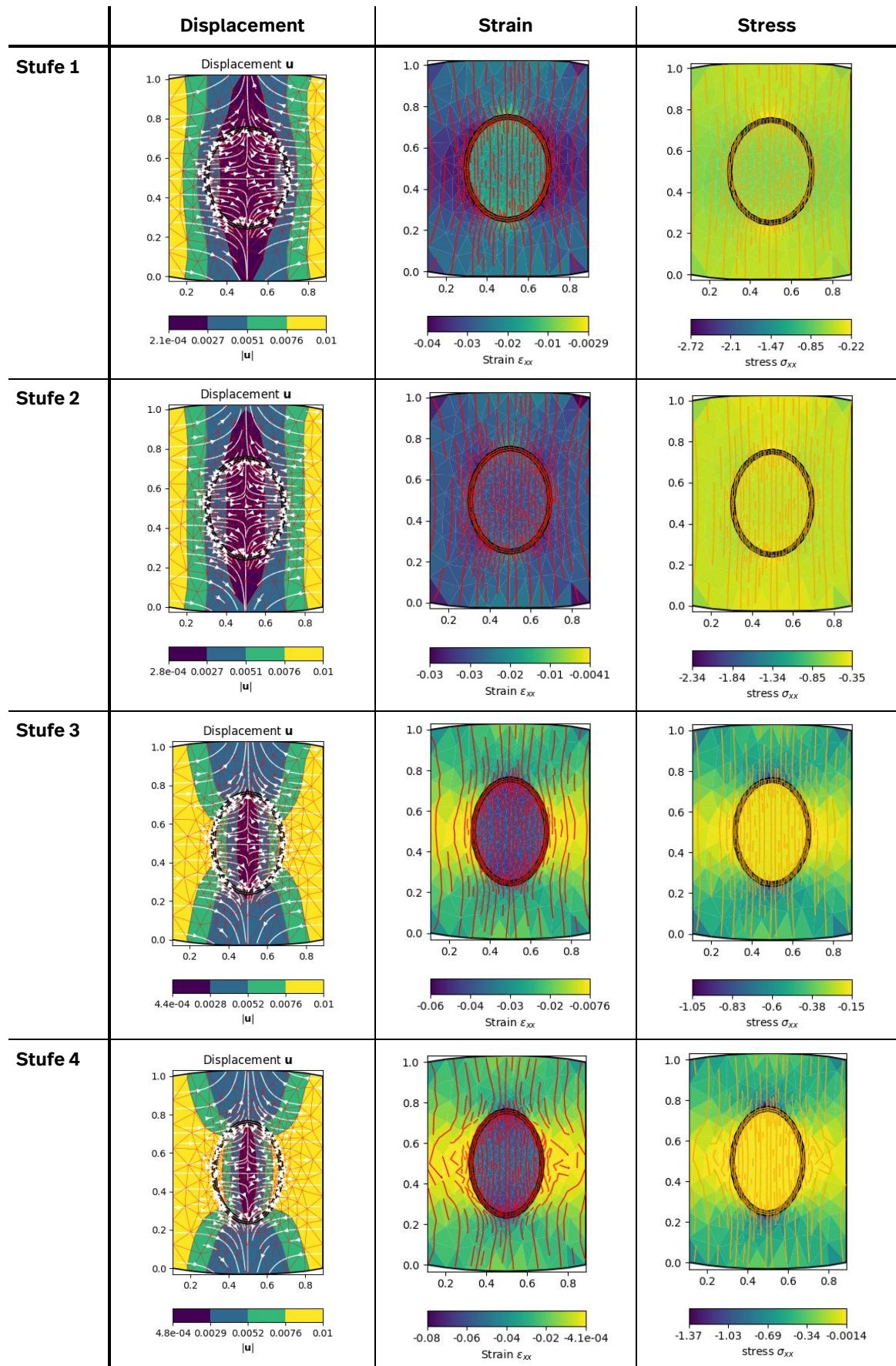


Abbildung 23: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_4mat-thin-loop-new“.

3.2.13 Modell „strain2 D_3mat-hole-loop-new“

Dieses Modell gleicht hinsichtlich seines Aufbaus dem Modell „strain2 D_4mat-loop-new“ (Kapitel 3.2.11); allerdings wird die massive Füllung durch eine Hohlform ersetzt. Die Ausgangsgeometrie inklusive des Gitters wird in Abbildung 24 gezeigt.

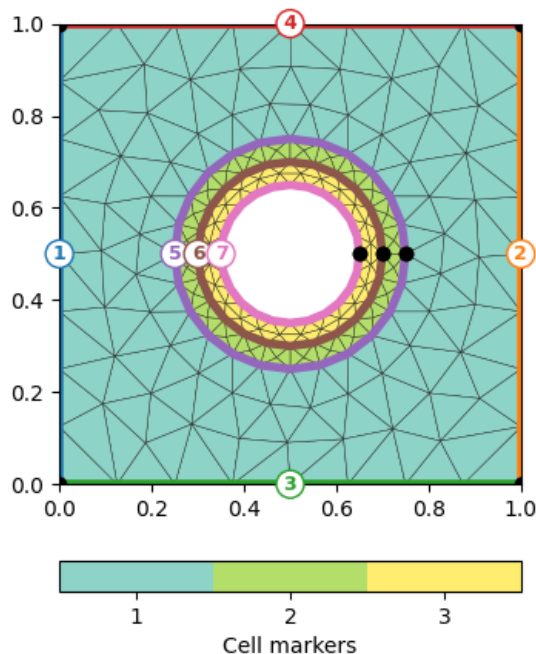


Abbildung 24: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_3mat-hole-loop-new“ mit einem Hohlzylinder mit Kupfer- und Stahlmantel (in Hellgrün beziehungsweise Gelb) in einer Steinsalzmatrix (grünblau).

Das Verhalten der einzelnen Strukturelemente des Behälters ist eine Mischung aus dem Verhalten, das in den Modellen „strain2 D_3mat-loop-hole“ (Kapitel 3.2.7) und „strain2 D_3mat-copper-hole“ (Kapitel 3.2.8) sowie „strain2 D_4mat-loop-new“ (Kapitel 3.2.11) beobachtet wurde. Es kann eine deutliche Zunahme des Achsenverhältnisses $\left(\frac{y}{x}\right)$ von Materialschwächungsstufe 2 zu Stufe 3 beobachtet werden (Tabelle 11). Im Schnitt wachsen die Achsenverhältnisse von Stufe 1 zu Stufe 2 um 5 Prozent, von Stufe 2 zu Stufe 3 um 9 Prozent und von Stufe 3 zu Stufe 4 um 4 Prozent. Obwohl Kupfer und Stahl erst in Stufe 4 deutlich schwächer werden als die Steinsalzmatrix, sorgt die Hohlform im Zentrum des Modells dafür, dass die Achsenverhältnisse schon von Stufe 2 zu Stufe 3 deutlich wachsen.

Tabelle 11: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_3mat-hole-loop-new“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Kupfer}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Stahl}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{hohl}$
Stufe 1	1,360	1,498	1,716
Stufe 2	1,414	1,574	1,838
Stufe 3	1.510	1.705	2.063
Stufe 4	1,551	1,758	2,159

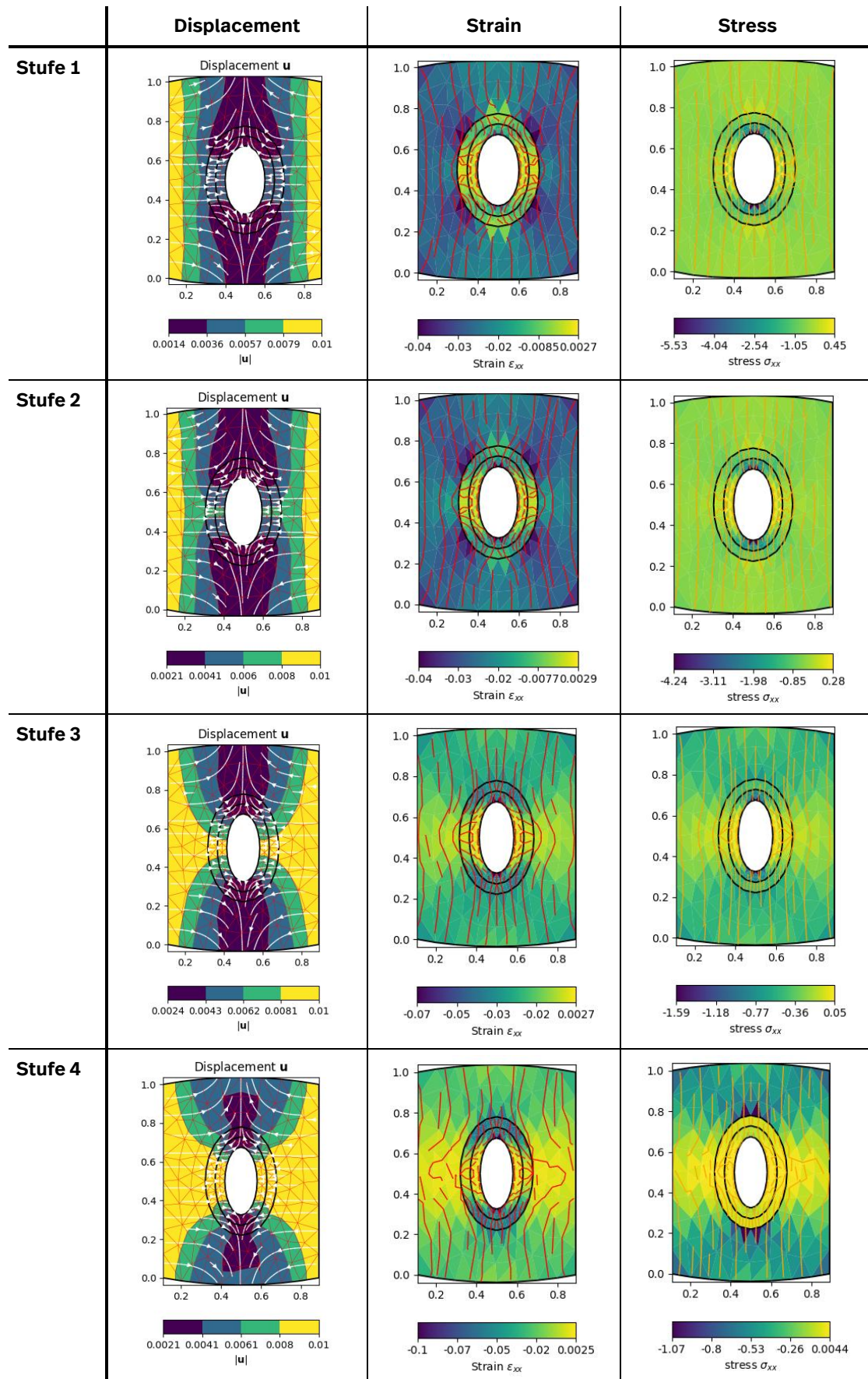


Abbildung 25: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen von Modell „strain2 D_3mat-hole-loop-new“.

Noch deutlicher macht sich die Hohlform bei den Displacement-, den Strain- und den Stressmustern bemerkbar (Abbildung 25). Diese zeigen von

Materialschwächungsstufe 1 an Materialtransport ins Innere des Modells an sowie nach außen gebeulte Strain- und Stresstrajektorien.

3.2.14 Modell „strain2 D_3mat-thin-hole-loop-new“

In diesem Modell wird die dickwandige, zusammengesetzte Konfiguration (Wandstärke: je 0,05 Einheiten für Kupfer- und Stahlring) durch eine dünnwandige ersetzt (Wandstärke: je 0,01 Einheiten für Kupfer- und Stahlring). Der Durchmesser der Hohlform im Kern der Behälterstruktur vergrößert sich dadurch von 0,3 Einheiten (dickwandig) auf 0,46 (dünnwandig). Die Ausgangsgeometrie inklusive des Gitters stellt sich wie folgt dar (Abbildung 26):

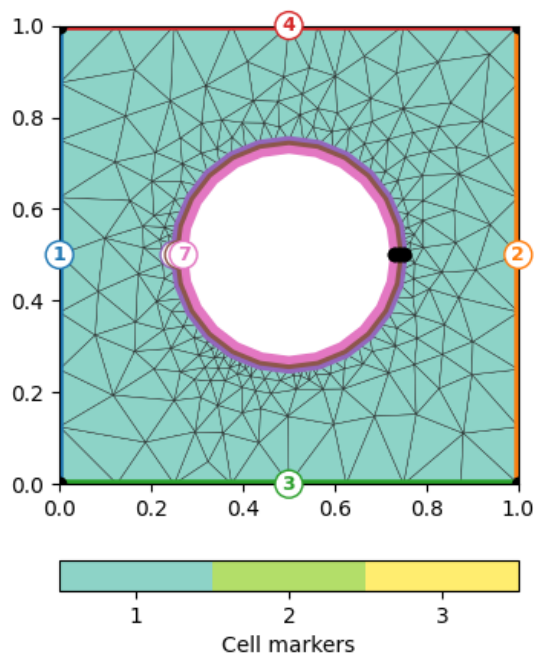


Abbildung 261: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_3mat-thin-hole-loop-new“ mit einem Hohlzylinder mit dünnem Kupfer- und Stahlmantel in einer Steinsalzmatrix (grünblau).

Das Displacement-, das Strain- und das Stressmuster (Abbildung 27) entsprechen dem, was für alle Modelle mit einer Hohlform im Zentrum beobachtet wurde (vergleiche Kapitel 3.2.4, 3.2.7, 3.2.8, 3.2.9, 3.2.10 und 3.2.13): Material wird aus der Steinsalzmatrix nach innen verlagert und die Strain- beziehungsweise Stresstrajektorien sind von Stufe 1 an nach außen gebeult.

Tabelle 12: Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_3mat-thin-hole-loop-new“.

	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Kupfer}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{Stahl}$	$\left(\frac{y}{x}\right)_{hohl}$
Stufe 1	2,017	2,085	2,164
Stufe 2	2,016	2,083	2,161
Stufe 3	2,018	2,082	2,157
Stufe 4	2,021	2,083	2,157

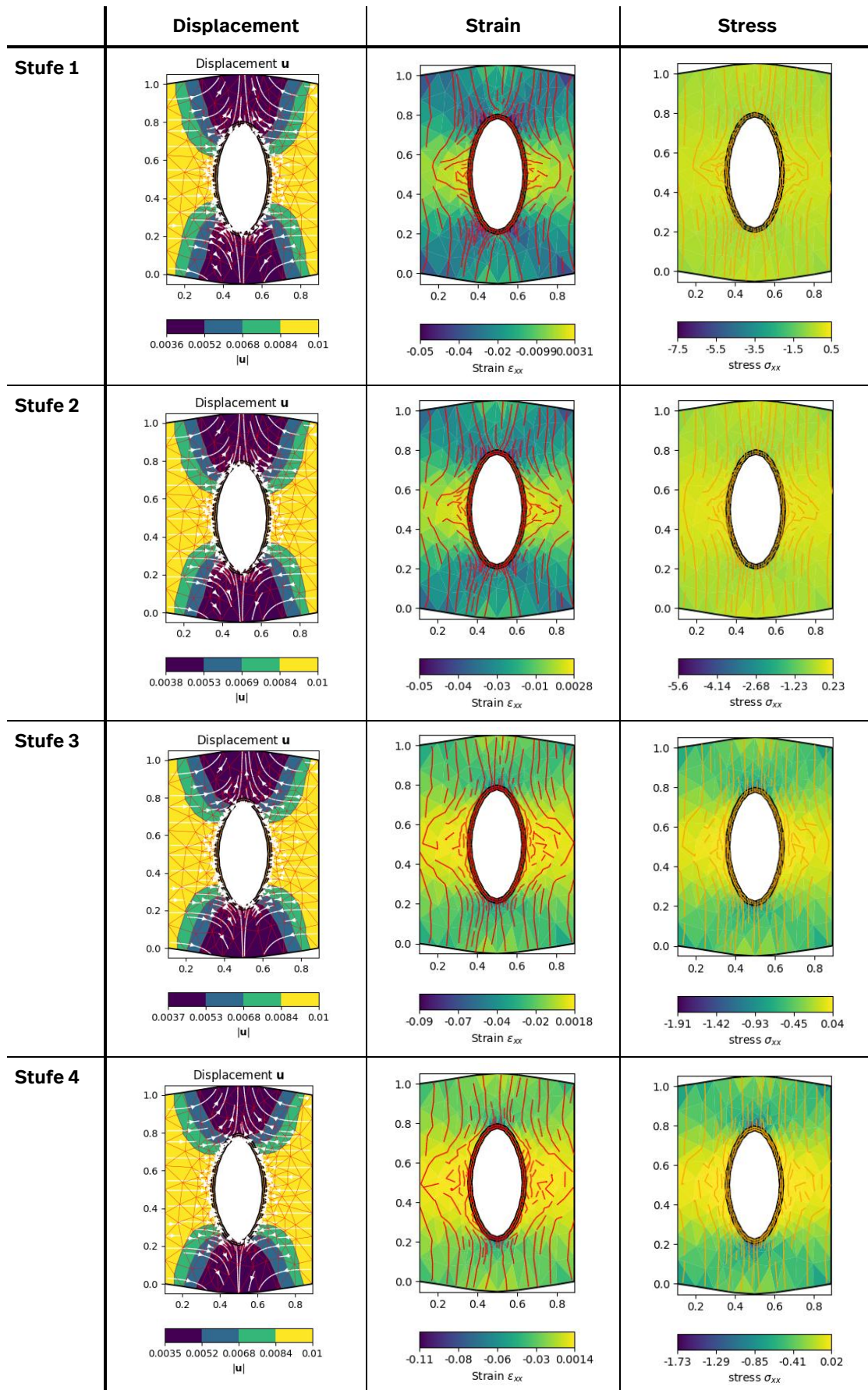


Abbildung 27: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_3mat-thin-hole-loop-new“.

Die Achsenverhältnisse des Ellipsenschnittes durch den Behälter (Tabelle 12) zeigen ein ähnliches Muster wie bei den anderen Modellen mit dünner

Behälterwandung um eine Hohlform (vergleiche Kapitel 3.2.9 und 3.2.10), bei denen es nur sehr kleine Änderungen in den $\left(\frac{y}{x}\right)$ -Verhältnissen gab. Im Modell „strain2 D_3mat-thin-hole-loop-new“ gibt es praktisch keine Änderungen in den Achsenverhältnissen, ähnlich wie im Modell ohne Behälterwandung „strain2 D_2Mat-hole-loop“ (siehe Kapitel 3.2.4). Teilweise verringern sich sogar die Achsenverhältnisse leicht mit Zunahme der Materialschwächung. Es handelt sich dabei aber um marginale Änderungen (zum Beispiel von 2,017 in Stufe 1 zu 2,016 in Stufe 2 für den Kupferring oder von 2,083 in Stufe 2 zu 2,082 in Stufe 3 für den Stahlring). Niemals wird allerdings das $\left(\frac{y}{x}\right)$ -Maximalverhältnis von 2,649 aus dem Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“ erreicht.

4 Diskussion

Ausgangspunkt der hier vorgestellten numerischen Modellserie waren Analogmodelle (Dietl et al. 2008) zu der Frage, welche Deformationsmuster sich in einer plastischen Matrix um rigide Körper bilden. Die Modellierung erfolgte am Beispiel prädeformativer Plutone, aber die Modelle sind auch auf rigide Behälter in einer mit Bentonit oder Salzgrus verfüllten Endlagerstrecke anwendbar. Dabei zeigte sich, dass sich direkt um die eingesetzten rigiden Körper Trichterstrukturen beziehungsweise nach innen gerichtete Straintrajektorien bilden (Abbildung 1 b). Eine analytische Lösung der gleichen Fragestellung (ebenfalls für prä- und syndeformative Plutone) wurde von Mandal und Chakraborty (1990) geliefert. Nach diesen Autoren bilden sich senkrecht zur Einengungsrichtung x Straintrajektorien und Foliationen aus, die auf die rigiden Körper weisen, in x -Richtung bilden sich jedoch konvexe, nach außen ausgebeulte Straintrajektorien und Foliationsflächen parallel zum Rand der rigiden Körper (Abbildung 2).

Um ein besseres Verständnis für die im Analogmodell und in der analytischen Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) beobachteten Strukturen zu erwerben, wurde ein numerisches 2-D-Modell entwickelt, in dem eine plastische (inkompetente) Matrix um einen rigiden (kompetenten) Körper mit Kreisquerschnitt durch Einengung in x -Richtung deformiert wird. Das entstehende Straintrajektorienmuster ist generell auf den rigiden Körper ausgerichtet (Abbildung 3) und erinnert an die Trichterstrukturen aus dem Analogexperiment. Gleichzeitig wird Material nach außen verdrängt. Es entstehen nach außen gebeulte Displacementpfade, ähnlich den Foliationsflächen aus der analytischen Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) für einen syntektonischen Pluton mit einem hohen Magmendruck (entspricht einem hohen E-Modul des zentralen Körpers).

Um zu verstehen, welche Einflussgrößen die Deformation des rigiden Körpers in der plastischen Matrix bestimmen, wurden stark vereinfachte generische numerische Modelle betrachtet, die sich auf zwei Parameter fokussieren: E-Modul und Poissonverhältnis. Der rigide, kompetente Körper mit kreisförmigem Querschnitt dient hier als sehr einfaches 2-D-Analogon für ein Endlagergebäude, das sich in

einer Steinsalzmatrix befindet und im Laufe der Zeit mechanisch schwächer wird (zum Beispiel durch Korrosion). Es ist nicht zu erwarten, dass sich Korrosionsprozesse und eine damit gegebenenfalls einhergehende Abnahme der Steifigkeit der Behälterwandung auf den gesamten Durchmesser homogen ausbreiten und sich gleichzeitig auswirken. Außerdem sind bei einer Abnahme der Steifigkeit, die sich durch ein sinkendes E-Modul und ein steigendes Poissonverhältnis zeigt, weitere Parameter betroffen (zum Beispiel Festigkeit, Duktilität oder Bruchzähigkeit, siehe Han et al. 2024; Chen et al. 2024; Hou et al. 2016). Diese Einschränkungen des Detaillierungsgrades des Modells wurden für die Betrachtung des Effekts von Veränderungen linearelastischer Eigenschaften auf das Deformationsverhalten unterschiedlicher Materialien und einfacher Behälterkonfigurationen akzeptiert. Dies kommt auch in der Verwendung eines einfachen linearelastischen Löser zum Ausdruck sowie in der Annahme von ebener Verformung, wie sie auch für das einfache Mohr-Coulomb-Bruchkriterium Anwendung findet.

Bei allen für Kapitel 3.2 gerechneten Modellen wird die mechanische Schwächung des zunächst rigiden Körpers durch eine einfache Verringerung des E-Moduls und eine Vergrößerung des Poissonverhältnisses in vier Deformationsschritten erreicht. Am Ende des vierten Deformationsschrittes ist der zentrale Körper inkompetenter und weniger steif als die Steinsalzmatrix. Der verwendete Mechanik-Löser ist – entsprechend dem generischen und einfachen Charakter der gerechneten Modelle – ein linearelastischer Löser. Zeitabhängiges Kriechen wurde nicht berücksichtigt. Die elastische Deformation ist in allen Deformationsschritten gleich und entspricht einer Modellverkürzung in x-Richtung um 22 Prozent (bei gleichzeitigem Ausweichen in y-Richtung. Der obere und der untere Rand des Modells sind nicht fixiert).

Es wurden verschiedene Modellkonfigurationen getestet, um herauszufinden, welche Parameter zusammen mit den sich ändernden mechanischen Eigenschaften E und ν Einfluss auf die Deformationsmuster des modellierten Behälters und seiner Matrix haben:

- dickwandige und dünnwandige Behälterkonfigurationen
- Behälter mit Stahl- oder Kupferwandung oder einer Kombination aus beidem
- eine Stahlfüllung oder eine Hohlform im Zentrum des Behälters beziehungsweise eine Alternativfüllung im Fall der zusammengesetzten Kupfer-/Stahl-Behälter mit $E = 40 \text{ GPa}$ und $\nu = 0,20$.

Die Modelkonfigurationen werden in den Kapiteln 3.2.1 und 3.2.2 im Detail beschrieben; die Ergebnisse der zwölf Einzelmodelle finden sich in den Kapiteln 3.2.3 bis 3.2.14.

Die Ergebnisse der numerischen Modelle zeigen, dass schon eine leichte Verringerung des E-Moduls des rigidem Körpers zu einer Veränderung der Kreisform des Behälterquerschnittes hin zu einer Ellipse führt. Auch das Verhältnis von radialer zu axialer Deformation, das sich im Poissonverhältnis zeigt, spielt hier eine wichtige Rolle. Allerdings ändern sich die Verhältnisse von y-Achse zu x-Achse der Behälter nie im gleichen Maß, wie sich die Poissonverhältnisse der unterschiedlichen verwendeten Materialien von Deformationsschritt zu Deformationsschritt ändern, also von 1 Prozent (Faktor 1,01 in Schritt 1) über 14 Prozent (Faktor 1,14 in Schritt 2) und 27 Prozent (Faktor 1,27 in Schritt 3) bis 30 Prozent (Faktor 1,30 in Schritt 4). Im einfachen Modell des Stahlzylinders in der Steinsalzmatrix (Kapitel 3.2.3: Modell „strain2 D_2Mat-loop“) vergrößert sich das $\left(\frac{y}{x}\right)$ -Verhältnis von 1,038 (entspricht 4 Prozent Dehnung in y-Richtung in Schritt 1) über 1,059 in Schritt 2 (6 Prozent Dehnung in y-Richtung) bis hin zu 1,14 (14 Prozent Dehnung in Schritt 3) und schließlich 1,24 (gleich 24 Prozent Dehnung) in Schritt 4. Die Änderungen im Poissonverhältnis und der Achsenverhältnisse sind also von Schritt zu Schritt unterschiedlich, obwohl sie in die gleiche Richtung gehen.

Signifikant wird die Deformation immer dann, wenn der ehemals rigide Körper durch Verringerung des E-Moduls und Vergrößerung des Poissonverhältnisses unter die entsprechenden Werte von Steinsalz fällt ($E_{\text{Steinsalz}}$: 20 GPa, $\nu_{\text{Steinsalz}}$: 0,25; Liu et al. 2017). Erst dann vergrößern sich die Achsenverhältnisse um bis zu 12 Prozent (siehe zum Beispiel Tabelle 9) und es bildet sich ein deutlich elliptischer Querschnitt des schwächer werdenden Behälters aus. Am stärksten ist dieser Effekt bei der reinen Hohlform (Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“: Kapitel 3.2.4) zu sehen. Dort, wo die zentrale Hohlform nicht durch einen Stahl- und/oder Kupferring geschützt ist, verkürzt sich die x-Achse schon bei der ersten Deformationsstufe um 55 Prozent und die y-Achse wächst um 17 Prozent. Da wegen der fehlenden Steifigkeit der Hohlform keine Materialschwächung durch Veränderung der mechanischen Module eintreten kann, ist das Verhältnis von langer zu kurzer Achse der Deformationsellipse in allen vier Deformationsstufen 2,649 (Tabelle 2). Das ist zugleich das maximal erreichbare Achsenverhältnis bei den gewählten Deformationsparametern.

Auch das verwendete Material hat Auswirkungen auf die beobachteten Achsenverhältnisse. Ein weicherer Kupferring entwickelt ein größeres $\left(\frac{y}{x}\right)$ -Verhältnis als der steifere Stahl. Dies zeigt sich deutlich, wenn man die Modelle „strain2 D_3mat-loop-hole“ (Kapitel 3.2.7 und Tabelle 5; Stahlmantel) und „strain2 D_3mat-copper-hole“ (Kapitel 3.2.8 und Tabelle 6; Kupfermantel) vergleicht. Die Elliptizität des sich deformierenden Kupfermantels ist im Schnitt in allen vier Materialschwächungsstufen um 5 Prozent größer als die des entsprechenden Stahlmantels. Dabei gleichen sich die Elliptizitäten mit abnehmendem E-Modul und wachsendem Poissonverhältnis an, da E und ν beider Behältermaterialien mit jeder Materialschwächungsstufe näher an die entsprechenden Werte von Steinsalz heranrücken und diese schließlich in Stufe 4 unterschreiten. Auch die mechanischen Module beider Materialien nähern sich von Deformationsstufe

1 zu 4 immer weiter einander an. Liegt E_{Stahl} in Stufe 1 noch bei 180 GPa und E_{Kupfer} bei 108 GPa, so liegen die entsprechenden Werte in Stufe 4 deutlich näher beieinander: $E_{\text{Stahl}} = 2$ GPa und E_{Kupfer} bei 1,2 GPa. Gleiches gilt für die Poissonverhältnisse. Entsprechend gleichen sich auch die Achsenverhältnisse der Mantellellipsen durch Angleichung der mechanischen Module an.

Auch die Wandstärke hat Einfluss auf die Elliptizität der Kupfer- beziehungsweise Stahlmäntel. Dünnwandige Mäntel neigen dazu, Achsenverhältnisse ähnlich denen der Füllung zu entwickeln. Bei dickwandigen Mänteln ist der Unterschied in den Achsenverhältnissen zur Behälterfüllung deutlicher. Betrachtet man die Modelle „strain2 D_4mat-loop-new“ (zusammengesetzter dickwandiger Mantel um alternative Füllung; Kapitel 3.2.11, Tabelle 9) und „strain2 D_4mat-thin-loop-new“ (zusammengesetzter dünnwandiger Mantel um alternative Füllung; Kapitel 3.2.12, Tabelle 10) sowie „strain2 D_3mat-loop-key“ (dickwandiger Kupfermantel um Stahlkern; Kapitel 3.2.5, Tabelle 3) und „strain2 D_2mat-thin-loop“ (dünnwandiger Kupfermantel um Stahlkern; Kapitel 3.2.6, Tabelle 4), so sieht man den Wandstärkeneffekt deutlich: Der dickwandige Kupferring ist mit Erreichen von Materialschwächungsstufe 4 jeweils deutlich elliptischer als die Füllung: 5,9 Prozent (dickwandig) im Vergleich zu 1,5 Prozent (dünnwandig) bei den zusammengesetzten Mänteln und 3 Prozent (dickwandig) im Vergleich zu 0,4 Prozent (dünnwandig) bei den einfachen Kupfermänteln.

Bei den Displacementpfaden sowie den Strain- und den Stresstrajektorien wurden zwei generelle Muster festgestellt, die in ähnlicher Form auch schon in den Analogexperimenten und der analytischen Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) beobachtet worden waren. Zum einen gibt es nach außen gerichtete konvexe Materialverlagerungsmuster, die begleitet werden von nach innen auf den Behälter gerichteten, konkaven Strain- und Stresspfaden. Sie entsprechen den im Analogexperiment beobachteten Trichterstrukturen (Abbildung 1 b) und den Straintrajektorien in der analytischen Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) – siehe Abbildung 2. Die Straintrajektorien der analytischen Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) konnten eins zu eins abgebildet werden. Im Analogexperiment treten die Trichterstrukturen senkrecht zur Einengungsrichtung auf. Die plastische Matrix wird in Einengungsrichtung verformt. Da im Analogexperiment die Deformation in 3-D stattfindet und nicht in 2-D wie in der analytischen Lösung und unseren generischen numerischen Modellen, stößt die Vergleichbarkeit hier an ihre Grenzen.

In den Ergebnissen der numerischen Modelle zeigen sich diese Muster bei den Strain- und den Stresstrajektorien immer dann, wenn das Behältermaterial steifer ist als die Steinsalzmatrix. Sobald Stahl und Kupfer (oder die alternative Füllung der zusammengesetzten Behälter aus den in den Kapitel 3.2.11 und 3.2.12 beschriebenen Modellen) schwächer als die Steinsalzmatrix werden, kehren sich diese Muster um: der Materialtransport geht dann nach innen und die Strain- und die Stresstrajektorien entwickeln eine konvexe, nach außen ausgebeulte Geometrie. Der Übergang ist gut zu sehen im Modell „strain2 D_4mat-loop-new“

(3.2.11; Abbildung 21). Die unterschiedlichen Displacementpfade erklären sich direkt aus der Steifigkeit beziehungsweise (In)kompetenz des Behälters. Materialverlagerung ins Modellinnere kann natürlich erst geschehen, wenn der Behälter an Steifigkeit verliert. Die konkaven Strain- und Stresspfade sind das Ergebnis der Strain- und der Stressminima direkt an den langen Seiten der Behälterellipsen (in x -Richtung) bei gleichzeitiger Entwicklung von Strain- und Stressmaxima auf den Kopfseiten der Ellipsen (in y -Richtung). Die Trajektorien zeichnen diese Strain- und Stressschatten beziehungsweise -spitzen nach. Fehlen Widerlager gegen die Einengung in x -Richtung – sei es durch Schwächung der Behältermaterialien oder durch das Vorliegen einer Hohlform –, kann sich ein hoher Strain beziehungsweise ein großer Stress in x -Richtung senkrecht zur Langachse der sich entwickelnden Deformationsellipse ausbilden; die entsprechenden Trajektorien beulen sich nach außen. Im analytischen Ansatz von Mandal und Chakraborty (1990) fehlt die flächenmäßige und abgestufte Strain- und Stressverteilung, welche die numerische Lösung bietet. In der numerischen Lösung bilden die Strain- und die Stresstrajektorien eben diese flächenhafte Strain- und Stressverteilung ab. Sie führt zu den konkaven Mustern bei einem rigiden Körper im Zentrum des Modells und zu konvexen Mustern im Fall eines schwachen/weichen Körpers im Zentrum des Modells. Fehlt die flächenhafte Strain- und Stressberechnung, bilden die Straintrajektorien eher das Displacement ab und sind in x -Richtung immer konvex und nach außen gerichtet.

5 Schlussfolgerungen

Die numerischen Modelle zeigen, dass bereits die Änderung weniger Parameter in einem einfachen und generischen System zu einer breiten Variation an Deformationsmustern führen kann. Im vorliegenden Beispiel führen Veränderungen im mechanischen Verhalten eines zylindrischen Metallbehälters zu unterschiedlichen Deformationsmustern. Modelliert wurde der Verlust der Steifigkeit der Behältermaterialien Stahl und Kupfer bei unterschiedlichen Wanddicken des Behälters und dem Vorhandensein einer Behälterfüllung oder einer zentralen Hohlform. Je nach Konfiguration bildeten sich unterschiedlichen Elliptizitäten des deformierten Gebindes und verschiedene Strain-/Stressmuster in der plastischen Stein-salzmatrix um den rigiden Körper. Diese einfachen, an Komplexität stark reduzierten Modelle und ihre Abbildung mit einem ebenso einfachen linearelastischen Löser geben damit erste Einblicke in Deformationsprozesse, die für ein Endlagersystem grundsätzlich zu betrachten sind. Allerdings ist eine Übertragung auf ein echtes Endlagersystem nicht ohne weiteres möglich. Die vorgestellten Modelle machen einige sehr vereinfachende Annahmen: (1) Kriechprozessen werden nicht modelliert. (2) Die Behältergeometrie ist sehr einfach. (3) Es wird angenommen, dass Kupfer *und* Stahl gleichzeitig und vollständig korrodieren beziehungsweise schwächer werden. (4) Die seitliche Einengung in x -Richtung wird durch Ausweichen nach oben und unten kompensiert. Letzteres ist im Modell möglich, weil der obere und der untere Rand der Modelle nicht fixiert wurden. In den

Einlagerungsstrecken eines Endlagerbergwerkes ist dies natürlich nicht möglich, auch wenn die drei Wirtsgesteine Steinsalz, Ton und Kristallin hier unterschiedliches Verhalten zeigen. So wird insbesondere in einem Salzbergwerk, aber auch in plastischem Ton Konvergenz auftreten. Im Kristallingestein hingegen können Firste und Ulmen grundsätzlich als stabil betrachtet werden. Die realen Strain- und Stressmuster unterscheiden sich vermutlich von den im aktuellen Vorhaben errechneten Mustern, auch wenn das beobachtete Deformationsverhalten für die Materialcharakteristika (Stahl ist fester als Kupfer, Hohlkörper ergeben maximale Achsenverhältnisse und es erfolgt eine Umkehrung der Straintrajektorien, wenn $E_{\text{Behälter}}$ kleiner ist als $E_{\text{Steinsalz}}$) folgerichtig ist.

Die sehr vereinfachten Randbedingungen sind auch auf die Zielstellung zurückzuführen, den Code Oskar zu testen. Dies ließ sich am günstigsten mit einer Fokussierung auf wenige Parameter und einfache Eingangsdaten realisieren. Im vorliegenden Projekt konnte gezeigt werden, dass der FEM-Python-Code Oskar die Analogmodelle von Dietl et al. (2008) sowie die analytische Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) gut abbildet und für die betrachtete generische Fragestellung sinnvoll verwendet werden kann.

Der nächste Schritt ist eine Erweiterung des Modells hinsichtlich der Implementierung komplexerer Prozesse wie zum Beispiel plastisches Kriechen der Steinsalzmatrix oder bruchhaftes Versagen des Behälters. Die Betrachtung von Kriechprozessen würde es erlauben, mit absoluten Zeiten zu arbeiten. Aufbauend auf den vorliegenden Modellen kann auch die oben angesprochene Fixierung von oberem und unterem Rand des Modells getestet werden. Ebenso interessant ist es, den Behälter nicht nur in 2-D, sondern auch in 3-D zu betrachten. Der Vergleich mit den Analogexperimenten hat gezeigt, dass trotz der Ähnlichkeit der beobachteten Strukturen in 3-D komplexere Prozesse stattfinden als in 2-D. Das Entstehen von echten Trichterstrukturen und Falten in der Matrix kann nur in 3-D beschrieben werden. Falten können nur entstehen, wenn die Matrix aus unterschiedlich kompetenten Materialien aufgebaut ist. Hier kann mit komplexeren 3-D-Modellen auch die hauseigene Modelliersoftware Oskar weiterentwickelt und getestet werden. Voraussetzung dafür ist es, zu bewerten, wie realistisch die in den generischen 2-D-Modellen betrachteten Bedingungen sind. Welches der Modelle beziehungsweise welche Aspekte der einzelnen Modelle kommen der Realität nahe und sollten in Zukunft Teil von komplexeren Modellen sein? Zur weiteren Validierung der vorgestellten numerischen Ergebnisse wäre eine Weiterentwicklung der analytischen Lösung sinnvoll, um zu überprüfen, ob auch sie konkave, nach außen geformte Straintrajektorien in der Matrix liefert, wenn der zentrale Körper inkompetenter als die Matrix ist.

Die vorliegenden Modelle und die benutzerfreundliche Programmierung in Form von Jupyter-Skripten in einem beliebigen Webbrowser bieten grundsätzlich die Möglichkeit, einfache numerische Modelle in transparenter Form der interessierten Öffentlichkeit zur Verfügung zu stellen. Damit kann der Bürgerdialog auch auf naturwissenschaftliche Fragestellungen auf eine transparente Weise ausgeweitet

werden. Modelle wie die hier vorgestellten könnten in den Internetauftritt des BASE eingebunden werden. Bürgerinnen und Bürger könnten eingeladen werden, ähnliche einfache Modelle selbst zu rechnen.

Literaturverzeichnis

Chen, Yao; Ma, Boshi; Lu, Ruihua (2024): Experimental Assessment of Mechanical Properties of Corroded Low-Alloy Structural Steel. In: *Buildings* 14 (5), S. 1457. DOI: 10.3390/buildings14051457.

Deutsches Kupferinstitut (2005): Cu-ETP. Hg. v. Deutsches Kupferinstitut. Online verfügbar unter <https://kupfer.de/wp-content/uploads/2019/11/Cu-ETP.pdf>, zuletzt geprüft am 16.06.2025.

Dietl, C.; Forien, M.; Koyi, H. A. (2008): Zentrifugalexperimente zur Deformation einer plastisch reagierenden Kruste um prädefor-mativ intrudierte Plutone. Unpublizierte Analogmodelle.

Hall, David S.; Behazin, Mehran; Jeffrey Binns, W.; Keech, Peter G. (2021): An evaluation of corrosion processes affecting copper-coated nuclear waste containers in a deep geological repository. In: *Progress in Materials Science* 118 (3), S. 1–28. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2020.100766.

Han, Wenbing; Nie, Shidong; Wang, Yuansheng; Liu, Min; Chen, Zhenye; Chen, Jieyu et al. (2024): Experimental and numerical investigation on cyclic mechanical properties of high-strength steel (HSS) after corrosion damage. In: *Journal of Building Engineering* 97, S. 110900. DOI: 10.1016/j.jobbe.2024.110900.

Hawemann, Friedrich; Mancktelow, Neil; Wex, Sebastian; Pennacchioni, Giorgio; Camacho, Alfredo (2019): Fracturing and crystal plastic behaviour of garnet under seismic stress in the dry lower continental crust (Musgrave Ranges, Central Australia). In: *Solid Earth* 10 (5), S. 1635–1649. DOI: 10.5194/se-10-1635-2019.

Hou, Guiting; Yao, Weihao; Yi, Xuelei (2006): Discussion on the rheological factors influencing the complexity of fractal folds. In: *J.Virt.Ex* 21. DOI: 10.3809/jvirtex.2006.00146.

Hou, Yingbo; Lei, Deqing; Li, Shujin; Yang, Wei; Li, Chun-Qing (2016): Experimental Investigation on Corrosion Effect on Mechanical Properties of Buried Metal Pipes. In: *International Journal of Corrosion* 2016, S. 1–13. DOI: 10.1155/2016/5808372.

Jiang, Baozhen; Doi, Kotaro; Tsuchiya, Koichi; Kawano, Yutaka; Kori, Ami; Ikushima, Kenji (2020): Micromechanical properties of steel corrosion products in concrete studied by nano-indentation technique. In: *Corrosion Science* 163, S. 108304. DOI: 10.1016/j.corsci.2019.108304.

Koyi, H. A. (1988): Experimental modeling of the role of gravity and lateral shortening in the Zagros mountain belt. In: *AAPG Bull.* 72, S. 1381–1394.

Li, Jian-Zhi; Zhao, Yi-Yao; Wang, Jun-Jie (2022): Prediction Method of Steel Corrosion Rate Based on the Helix Distributed Sensor. In: *Micromachines* 13 (11). DOI: 10.3390/mi13111868.

Liu, Ning; Li, Min; Chen, Weimin (2017): Mechanical deterioration of rock salt at different confinement levels: A grain-based lattice scheme assessment. In: *Computers and Geotechnics* 84, S. 210–224. DOI: 10.1016/j.compgeo.2016.12.007.

Mandal, Nibir; Chakraborty, Chandan (1990): Strain fields and foliation trajectories around pre-, syn-, and post-tectonic plutons in coaxially deformed terranes. In: *Geological Journal* 25 (1), S. 19–33. DOI: 10.1002/gj.3350250103.

Paterson, Scott R.; Tobisch, Othmar T. (1988): Using pluton ages to date regional deformations: Problems with commonly used criteria. In: *Geol.* 16 (12), S. 1108. DOI: 10.1130/0091-7613(1988)016%3C1108:UPATDR%3E2.3.CO;2.

Paterson, Scott R.; Tobisch, Othmar T.; Vernon, Ron H. (1989): Criteria for establishing the relative timing of pluton emplacement and regional deformation. In: *Geol.* 17 (5), S. 475. DOI: 10.1130/0091-7613(1989)017<0475:CFETRT>2.3.CO;2.

Ragan, Donal M. (2009): Structural geology. An introduction to geometrical techniques. Fourth edition. Cambridge: Cambridge University Press.

Richter, Friedrich (1983): Physikalische Eigenschaften von Stählen und ihre Temperaturabhängigkeit: Polynome und graphische Darstellungen.

Schmalholz, Stefan M. (2006): Scaled amplification equation: A key to the folding history of buckled viscous single-layers. In: *Tectonophysics* 419 (1-4), S. 41–53. DOI: 10.1016/j.tecto.2006.03.008.

Schmalholz, Stefan Markus; Mancktelow, Neil Sydney (2016): Folding and necking across the scales: a review of theoretical and experimental results and their applications, 2016.

Standish, Thalia; Chen, Jian; Jacklin, Rebecca; Jakupi, Pellumb; Ramamurthy, Sridhar; Zagidulin, Dmitrij et al. (2016): CORROSION OF COPPER-COATED STEEL HIGH LEVEL NUCLEAR WASTE CONTAINERS UNDER PERMANENT DISPOSAL CONDITIONS. In: *Electrochimica Acta* 211, S. 331–342. DOI: 10.1016/j.electacta.2016.05.135.

Werme, Lars; Sellin, Patrik; Kjellbert, Nils (1992): Copper canisters for nuclear high level waste disposal. Corrosion aspects. Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB) (Technical Report, TR-92-26).

You, Chen; Chuai, Yunhan; Briggs, Scott; Orazem, Mark E. (2024): Model for corrosion of copper in a nuclear waste repository. In: *Corrosion Science* 226, S. 111658. DOI: 10.1016/j.corsci.2023.111658.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Deformationsstrukturen aus den Analogexperimenten. In a) sticht das Faltenmuster hervor. In b) fällt die Trichterstruktur in der Matrix um den rigiden Körper auf. Die Einengung erfolgte parallel zur kurzen Bildkante.	2
Abbildung 2: Analytische Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) für einen a) prädeformativen Pluton und b) einen syndeformativen Pluton, bei dem der Magmendruck die in X_1 -Richtung einengende orogene Spannung deutlich übersteigt. Gezeigt werden jeweils die Straintrajektorien für die Langachsen der Strainellipsen. Die Straintrajektorien repräsentieren die Tangenten an die Achsen der Strainellipsen (zum Beispiel Ragan 2009).	4
Abbildung 3: Erfolgreiche Implementierung der analytischen Lösung für einen syndeformativen Pluton mit hohem Magmendruck von Mandal und Chakraborty (1990) mit dem hauseigenen Code des BASE Oskar. Die Evaluierung der analytischen Lösung von Mandal und Chakraborty (1990) mit einem numerischen Näherungsverfahren diente als Grundlage für die Berechnung der Deformation einer plastischen Matrix um einen rigiden Körper. a) Materialverschiebung (Displacement), b) Interdeformation in x -Richtung (Strain). Da das Modell klein und nicht sehr rechenintensiv ist, wurde trotz Spiegelsymmetrie die gesamte Modelldomäne diskretisiert und gerechnet. Das in Abbildung 3 b dargestellte Strainmuster gleicht dem von Mandal und Chakraborty (1990) (vergleiche Abbildung 2 b).	6
Abbildung 4: Die Ausgangsgeometrie von Modell „strain2 D_2Mat-loop“ mit einem Stahlvollzylinder (in Gelb) in einer Steinsalzmatrix (in Blaugrün). Die unterschiedlich farbigen Linien zeigen die einzelnen Grenzflächen des Modells.	9
Abbildung 5: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_2Mat-loop“.	11
Abbildung 6: Die Ausgangsgeometrie von Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“ mit einem kreisförmigen Loch (Kreisschnitt des Hohlzylinders; farblos/weiß) in einer Steinsalzmatrix (blaugrün).	12
Abbildung 7: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“.	13
Abbildung 8: Die Ausgangsgeometrie von Modell „strain2 D_3mat-loop-key“ mit einem Stahlvollzylinder (gelb) mit Kupfermantel (hellgrün) in einer Steinsalzmatrix (blaugrün).	14
Abbildung 9: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen von Modell „strain2 D_3mat-loop-key“.	16
Abbildung 10: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_2mat-thin-loop“ mit einem Stahlvollzylinder mit dünnem Kupfermantel in einer Steinsalzmatrix.	17
Abbildung 11: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_2mat-thin-loop“.	18
Abbildung 12: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_3mat-loop-hole“ mit einem Hohlzylinder mit Stahlmantel in einer Steinsalzmatrix.	19

Abbildung 13: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_3mat-loop-hole“	20
Abbildung 14: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_3mat-copper-hole“ mit einem Hohlzylinder mit Kupfermantel in einer Steinsalzmatrix.	21
Abbildung 15: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_3mat-copper-hole“	22
Abbildung 16: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-steel“ mit einem Hohlzylinder mit dünnem Stahlmantel in einer Steinsalzmatrix.	23
Abbildung 17: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-steel“	24
Abbildung 18: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-loop“ mit einem Hohlzylinder mit dünnem Kupfermantel in einer Steinsalzmatrix.....	25
Abbildung 19: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-loop“	26
Abbildung 20: Die Ausgangsgeometrie von Modell „strain2 D_4mat-loop-new“ mit einem Vollzylinder mit Kupfer- und Stahlmantel (in Blau beziehungsweise Grau) in einer Steinsalzmatrix (grün); die Füllung des Zylinders (in Gelb) ist separat spezifiziert ($E = 40 \text{ GPa}$, $\nu = 0,20$).....	27
Abbildung 21: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_4mat-loop-new“	28
Abbildung 22: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_4mat-thin-loop-new“ mit einem Vollzylinder mit Kupfer- und Stahlmantel in einer Steinsalzmatrix (grün); die alternative Füllung des Zylinders (gelb) ist extra spezifiziert ($E = 40 \text{ GPa}$, $\nu = 0,20$).....	29
Abbildung 23: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_4mat-thin-loop-new“	31
Abbildung 24: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_3mat-hole-loop-new“ mit einem Hohlzylinder mit Kupfer- und Stahlmantel (in Hellgrün beziehungsweise Gelb) in einer Steinsalzmatrix (grünblau).	32
Abbildung 25: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen von Modell „strain2 D_3mat-hole-loop-new“	33
Abbildung 26: Die Ausgangsgeometrie im Modell „strain2 D_3mat-thin-hole-loop-new“ mit einem Hohlzylinder mit dünnem Kupfer- und Stahlmantel in einer Steinsalzmatrix (grünblau).....	34
Abbildung 27: Displacement-, Strain- und Stressmuster für alle vier Materialschwächungsstufen im Modell „strain2 D_3mat-thin-hole-loop-new“	35

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_2Mat-loop“	10
Tabelle 2:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_2Mat-hole-loop“	12
Tabelle 3:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_3mat-loop-key“	15
Tabelle 4:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_2mat-thin-loop“	17
Tabelle 5:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_3mat-loop-hole“	19
Tabelle 6:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_3mat-copper-hole“	21
Tabelle 7:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-steel“	23
Tabelle 8:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_2mat-thin-hole-loop“	25
Tabelle 9:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_4mat-loop-new“	27
Tabelle 10:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_4mat-thin-loop-new“	30
Tabelle 11:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_3mat-hole-loop-new“	32
Tabelle 12:	Achsenverhältnisse bei den vier Materialschwächungsstufen für das Modell „strain2 D_3mat-thin-hole-loop-new“	34

A Anhang: Code-Beispiele

A.1 Python-Code für die numerische Umsetzung der analytischen Lösung von Mandal & Chakraborty (1990)

```

import sys
sys.path.append('.././.././../')

import numpy as np
import pygimli as pg

import newfea as nf
from newfea import LinearElasticSolver, solveLinearElastic,
VectorSpace, solve, grad, strain

def MandalCharkraborty12(r, phi, e0, R, K):
    r""" Displacement equation (12) from `:cite:MandalCharkraborty12`

    Returns Displacement for ...

    in polar coordinates $(r, \phi)$

    Arguments
    -----

    R: float
        Radius of the pluton.
    K: float
        Ratio of the pluton's effective stress to the far-field
    tectonic stress.

    Returns
    -----
    * [u,v]
        Displacement for each point

    .. automath:
       :combine:

    """
    Rr = R**2 / r**2
    u = -e0 * r*((1 + 2*(1 - K)*Rr) * np.cos(phi) - Rr*(1 - Rr) *
np.cos(3*phi))
    v = e0 * r*((1 + 2*(      K)*Rr) * np.sin(phi) - Rr*(1 - Rr) *
np.sin(3*phi))
    return [u,v]

```

A.2 Python-Code für die numerische Umsetzung der analytischen Lösung von Mandal & Chakraborty (1990) und deren Darstellung (Displacement, Strain, Stress)

```

%matplotlib ipynpl

import numpy as np
import pygimli as pg
from newfea import *

box = pg.meshtools.createWorld(start = [0,0], end = [1,1], marker = 1,
worldMarkers = False)
circle = pg.meshtools.createCircle(pos = [0.5, 0.5], radius = 0.15,
nSegments = 24, marker = 2, area = 0.001,
                                boundaryMarker = 5)

world = box + circle
pg.show(world)

mesh = pg.meshtools.createMesh(world, area=0.01, quality =30)
pg.show(mesh, markers=True, showMesh=True)

rb = {'Dirichlet':{1:[0.1, 0],
                    2:[-0.1, 0]}}
E = {1:1, 2:5}
u = solveLinearElastic(mesh, E=E, nu=0.2, bc=rb)

eps = u.strain()
sig = u.stress()

u.mesh.deform(u, magnify=1)
ax, _ = pg.show(abs(u), label='$|\mathbf{u}|$', showMesh=True)
ax.set_title('Displacement $\mathbf{u}$')
pg.show(u, ax=ax, color='black')
pg.show(u.mesh, ax=ax, color='grey')

u.mesh.deform(u, magnify=1)
ax, _ = pg.show(u.mesh, eps[:,0], label='Strain $\epsilon_{xx}$')
ax.set_title('Principle axis of strain')
pg.show(u.mesh, principalStrainAxisField(eps, u.mesh), ax=ax,
color='black')

axs, _ = pg.show(1,4, figsize=(11,4.5))
sig = ensureVoigtMapping(sig)
pg.show(u.mesh, sig[:,0], label='stress $\sigma_{xx}$', ax=axs[0])
pg.show(u.mesh, sig[:,1], label='stress $\sigma_{yy}$', ax=axs[1])
pg.show(u.mesh, sig[:,2], label='stress $\sigma_{xy}$', ax=axs[2])
pg.show(u.mesh, stressTo(sig, 'mean'), label=r'stress $\sigma_{\rm mean}$', ax=axs[3])

```

A.3 Der allgemeine Python-Code zum Erstellen der Ausgangsgeometrie für die Modelle in Kapitel 3.2

```

host_rock = pg.meshtools.createWorld(start = [0,0], end = [1,1], marker
= 1, worldMarkers = False)
copper_casing = pg.meshtools.createCircle(pos = [0.5, 0.5], radius =
0.25, nSegments = 24, marker = 2, area = 0.001,
                                boundaryMarker = 5, isHole=False)
steel_casing = pg.meshtools.createCircle(pos = [0.5, 0.5], radius =
0.2, nSegments = 24, marker = 3, area = 0.001,
                                boundaryMarker = 6, isHole=False)
container_interior = pg.meshtools.createCircle(pos = [0.5, 0.5],
radius = 0.15, nSegments = 24, marker = 4, area = 0.001,
                                boundaryMarker = 7, isHole=False)
world = host_rock + copper_casing + steel_casing + container_interior
pg.show(world)

mesh = pg.meshtools.createMesh(world, area=0.01, quality =30)
pg.show(mesh, markers=True, showMesh=True)

```

A.4 Python-Code zur Änderung von E-Modul und Poissonverhältnis

Der entsprechende Python-Code sieht wie folgt aus:

```

rb = {'Dirichlet':{1:[0.1, 0],
                    2:[-0.1, 0]}}
E = {1:20, 2:120, 3:200, 4:40}
nu = {1:0.25, 2:0.36, 3:0.3, 4:0.20}
# 1 = Rock salt, 2 = Copper, 3 = Steel, 4 = Fuel
d=np.linspace(start=1, stop=0.01, num=10)
e=np.linspace(start=1, stop=1.300015, num=10)
for i in range(len(d)):
    rb ['Dirichlet'][1][0]=0.01
    rb ['Dirichlet'][2][0]=-0.01
    Ei={1:E[1], 2:E[2]*d[i], 3:E[3]*d[i], 4:E[4]*d[i]}
    print(Ei)
    nui={1:nu[1], 2:nu[2]*e[i], 3:nu[3]*e[i], 4:nu[4]*e[i]}
    print(nui)
    u = solveLinearElastic(mesh, E=Ei, nu=nui, bc=rb)
    mesh=u.mesh.deform(u, magnify=1)

eps = u.strain()
sig = u.stress()

```