



# Building the bridge between safety requirements and numerical modeling: an example considering crack development of Opalinus clay in laboratory and field scales

Tuanny Cajuhi, Jobst Maßmann, and Gesa Zieffle

Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover, 30655, Germany

**Correspondence:** Tuanny Cajuhi (tuanny.cajuhi@bgr.de)

Published: 10 November 2021

**Abstract.** Salt, crystalline and clay formations are under discussion as potential host rocks for storage of heat-generating radioactive waste. Each of these rocks has a different structure and composition, and consequently a different material behavior. The latter needs to be studied and evaluated with respect to the main aim: to find a place to store the waste in a safe and sustainable manner. Several requirements in the context of the safety of a repository need to be fulfilled, concerning the long-term as well as the operational phase. One key point in this matter is the integrity, which refers to retention of the isolating rock zone's containment capabilities. With the focus on some experimental and numerical investigations on the excavation influenced near-field behavior of Opalinus clay (OPA), this contribution aims to illustrate an example for the role of numerical modeling in safety assessment. Once, e.g. anthropogenic action such as excavation starts, the natural state of equilibrium in the formation is disturbed. Trying to restore it, the rock deforms (convergence) and/or releases energy in other ways such as cracking. This could lead to loss of integrity since crack nucleation and propagation can affect the mechanical stability and create paths to transport contaminants. During operation in the excavated rock, environmental changes, e.g. temperature and humidity, further affect its behavior. The understanding of these dynamic phenomena ideally needs to occur at the in situ scale; however, performing an experiment in the spatial and time scales of interest is not always possible. For this reason, the in situ problem needs to be formulated, abstracted and mathematically modeled. The interpretation of the results must take place with simplifying assumptions and complementary laboratory scale experiments can be used to improve understanding of the system. The real problem is approached stepwise, each step associated to the size of the model and its complexity. The gradually obtained knowledge is necessary to achieve a better understanding of the process and to evaluate the capacities and limitations of the models.

This contribution aims at showing the basic practical steps for numerical modeling with particular focus on the preparation and interpretation of the models and results, e.g. model calibration, verification and validation. As an example, the OPA at the Mont Terri site is chosen. The material parameters are obtained either experimentally or from the literature. We choose and perform laboratory scale simulations that are related to nearly the same mechanism as in the in situ scale. To have a first impression on the latter, a simplified, large-scale numerical model is prepared. The mechanism in study is drying and wetting, which is associated with shrinkage and swelling. We analyze the pore pressure and stress development in both scales. Thus, hydraulic mechanically coupled approaches are essential. The concept of effective stress is used, which combines the contributions of the solid and fluid phases (gas and liquid). In the current modeling approach, the gas pressure remains constant (atmospheric pressure) and during drying, the liquid pressure induces capillary pressure development and decrease of saturation. The laboratory scale simulation is important to evaluate the model of choice and to assess potential numerical problems. Furthermore, it can be used to perform a sensitivity study of material and numerical parameters. This step is necessary during the development or extension of numerical models as well as to evaluate their

applicability on new research questions. The simplified in situ scale numerical model is then extended. In this phase the numerical model is evaluated once again, especially with respect to its complexity. Furthermore, specific questions related to this scale are posed: overall behavior of the rock, influence of the excavation, seasonal and long-term effects.

In this contribution we deal with the long-term cyclic deformation (CD-A) experiment. The CD-A experiment has been taking place in the Mont Terri Rock Laboratory since October 2019. It consists of twin niches, a closed and an open niche, subjected to either high air humidity or seasonal humidity changes leading to saturation/desaturation during summer/winter in the OPA, respectively. Several parameters are periodically or continuously measured, including relative air humidity, convergence and crack development. We attempt to transfer the knowledge and numerical models developed in the small scale to the large scale and to evaluate the possibilities and limitations of the chosen approaches by comparing the numerical and experimental results.

**Kurzfassung.** Salz-, Kristallin- und Tonformationen sind als potenzielle Wirtsgesteine für die Lagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle im Gespräch. Jedes dieser Gesteine hat eine andere Struktur und Zusammensetzung und folglich ein anderes Materialverhalten. Letzteres muss im Hinblick auf das Hauptziel untersucht und bewertet werden: einen Ort zu finden, an dem die Abfälle auf sichere und nachhaltige Weise gelagert werden können. Im Zusammenhang mit der Sicherheit eines Endlagers müssen mehrere Anforderungen erfüllt werden, sowohl für die Langzeit- als auch für die Betriebsphase. Ein zentraler Punkt ist dabei die Integrität, d. h. die Aufrechterhaltung der Einschlussfähigkeit des einschlusswirksamen Gebirgsbereiches. Mit dem Schwerpunkt auf einigen experimentellen und numerischen Untersuchungen zum ausbruchsbeeinflussten Nahfeldverhalten von Opalinuston (OPA) soll dieser Beitrag ein Beispiel für die Rolle der numerischen Modellierung bei der Sicherheitsbewertung aufzeigen. Sobald z. B. eine anthropogene Maßnahme wie eine Auffahrung beginnt, wird der natürliche Gleichgewichtszustand in der Formation gestört. Bei dem Versuch, dieses Gleichgewicht wiederherzustellen, wird das Gestein verformt (Konvergenz) und/oder setzt auf andere Weise Energie frei, z. B. durch Rissbildung. Dies kann zu einem Verlust der Integrität führen, da die Entstehung und Ausbreitung von Rissen die mechanische Stabilität beeinträchtigen und Wege für den Transport von Schadstoffen schaffen kann. Während des Betriebs im aufgefahrenen Gestein wirken sich Umweltveränderungen, z. B. Temperatur und Feuchtigkeit, weiter auf das Verhalten des Gesteins aus. Das Verständnis dieser dynamischen Phänomene muss idealerweise auf der In-situ-Skala erfolgen; die Durchführung eines Experiments auf der interessierenden räumlichen und zeitlichen Skala ist jedoch nicht immer möglich. Aus diesem Grund muss das In-situ-Problem formuliert, abstrahiert und mathematisch modelliert werden. Die Interpretation der Ergebnisse muss unter vereinfachenden Annahmen erfolgen, und ergänzende Experimente im Labormaßstab können zum besseren Verständnis des Systems herangezogen werden. Das eigentliche Problem wird schrittweise angegangen, wobei jeder Schritt mit der Größe des Modells und seiner Komplexität zusammenhängt. Die schrittweise gewonnenen Erkenntnisse sind notwendig, um ein besseres Verständnis des Prozesses zu erlangen und die Fähigkeiten und Grenzen der Modelle zu bewerten.

Dieser Beitrag zielt darauf ab, die grundlegenden praktischen Schritte für die numerische Modellierung aufzuzeigen, mit besonderem Schwerpunkt auf der Vorbereitung und Interpretation der Modelle und Ergebnisse, z. B. Modellkalibrierung, -verifizierung und -validierung. Als Beispiel wird das OPA am Standort Mont Terri gewählt. Die Materialparameter werden entweder experimentell oder aus der Literatur ermittelt. Wir wählen und führen Simulationen im Labormaßstab durch, die sich auf nahezu denselben Mechanismus wie im In-situ-Maßstab beziehen. Um einen ersten Eindruck von letzterem zu gewinnen, wird ein vereinfachtes, großmaßstäbliches numerisches Modell erstellt. Der untersuchte Mechanismus ist die Ent- und Aufsättigung, die mit Schrumpfung und Quellung einhergeht. Wir analysieren die Porendruck- und Spannungsentwicklung in beiden Skalen. Daher sind gekoppelte hydraulisch-mechanisch Ansätze unerlässlich. Es wird das Konzept der effektiven Spannung verwendet, das die Beiträge der festen und fluiden Phasen (Gas und Flüssigkeit) kombiniert. Beim derzeitigen Modellierungsansatz bleibt der Gasdruck konstant (atmosphärischer Druck), und während der Trocknung führt der Flüssigkeitsdruck zur Entwicklung des Kapillardrucks und zur Abnahme der Sättigung. Die Simulation im Labormaßstab ist wichtig, um das Modell der Wahl zu bewerten und potenzielle numerische Probleme zu beurteilen. Außerdem kann sie zur Durchführung einer Sensitivitätsstudie der Material- und numerischen Parameter verwendet werden. Dieser Schritt ist bei der Entwicklung oder Erweiterung numerischer Modelle sowie bei der Bewertung ihrer Anwendbarkeit auf neue Forschungsfragen erforderlich. Das vereinfachte numerische Modell im In-situ-Maßstab wird dann erweitert. In dieser Phase wird das numerische Modell erneut bewertet, insbesondere im Hinblick auf seine Komplexität. Darüber hinaus werden spezifische Fragen in Bezug

auf diesen Maßstab gestellt: Gesamtverhalten des Gesteins, Einfluss der Auffahrung, saisonale und langfristige Auswirkungen.

In diesem Beitrag befassen wir uns mit dem langfristigen zyklischen Deformationsversuch (CD-A). Das CD-A-Experiment findet seit Oktober 2019 im Felslabor Mont Terri statt. Es besteht aus zwei Nischen, einer geschlossenen und einer offenen Nische, die entweder einer hohen Luftfeuchtigkeit oder saisonalen Feuchtigkeitsänderungen ausgesetzt sind, die zu einer Sättigung bzw. Entsättigung im Sommer/Winter im OPA führen. Mehrere Parameter werden periodisch oder kontinuierlich gemessen, darunter die relative Luftfeuchtigkeit, die Konvergenz und die Rissentwicklung. Wir versuchen, die im kleinen Maßstab entwickelten Kenntnisse und numerischen Modelle auf den großen Maßstab zu übertragen und die Möglichkeiten und Grenzen der gewählten Ansätze durch den Vergleich der numerischen und experimentellen Ergebnisse zu bewerten.