

T A

Č R

# Model transportu v okolí úložných vrtů

Petr Rálek

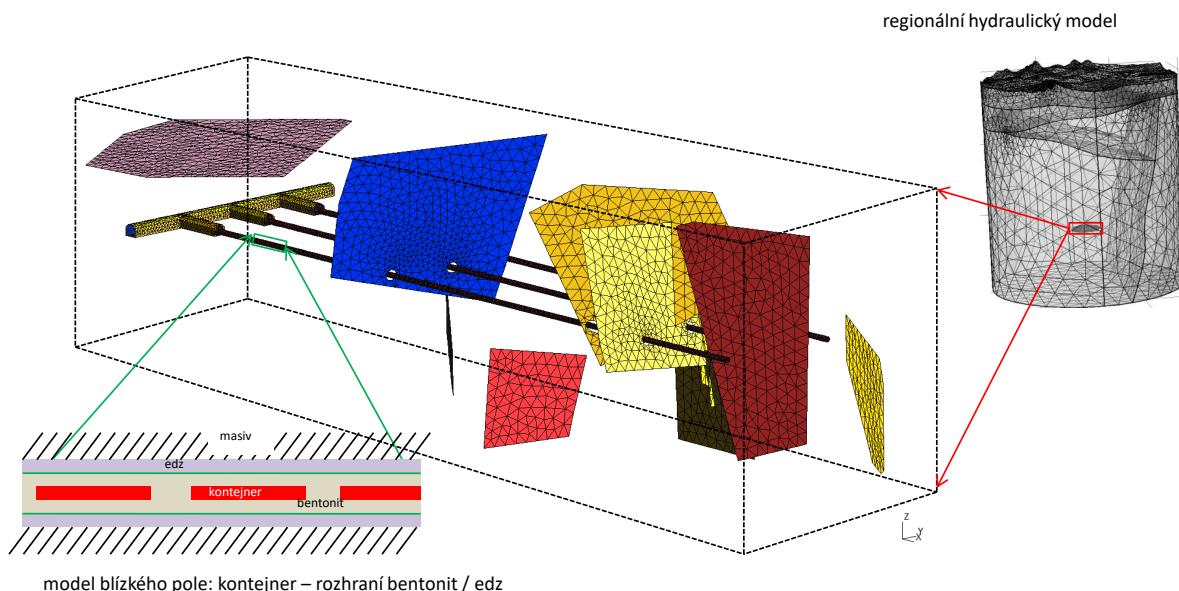
2020

## 1 Popis modelu

Model transportu popisuje šíření kontaminantu oblastí úložiště se zahrnutím EDZ a stochasticky generované puklinové sítě. Předpokladem je, že EDZ kolem úložných vrtů zesiluje průtoky podzemní vody podél těchto vrtů.

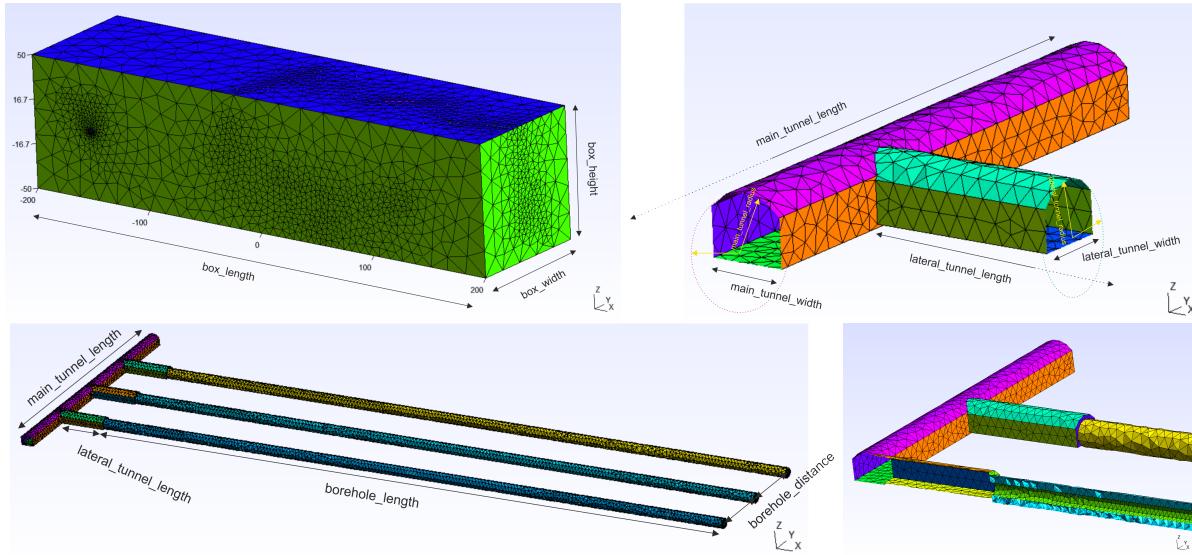
V hierarchii kontejner/bentonit/edz/úložiště/masiv/biosféra se model nachází mezi úrovněmi rozhraní bentonit/edz a vnější hranicí úložiště (či spíše ještě několika desítek metru dále). Pracuje s výsledky modelů dalších úrovní (viz obr. 1): a) jako zdrojový člen kontaminace slouží výsledky samostatného modelu blízkého pole (převzato), b) hydraulické podmínky na hranici oblasti úložiště jsou převzaty z regionálního hydrogeologického modelu [1].

Hlavním výstupem modelu by měla být časová řada koncentrace kontaminantu na vnější hranici úložiště, na které jsou založeny indikátory bezpečnosti EDZ navžené v rámci projektu.



Obrázek 1: Geometrie (části) úložiště s převzatými okrajovými podmínkami z dalších modelů.

## 1.1 Geometrie modelu



Obrázek 2: Jednotlivé části geometrie modelu (bez puklin). Vlevo nahoře: celý modelovaný blok masivu. Vpravo nahoře: hlavní rozrážka s bočními tunely (výřez). Vlevo dole: hlavní rozrážka s bočními tunely a horizontálními úložnými vrty s vrstvou edz. Vpravo dole: vertikální podélný řez prostředním vrtem s viditelnou vrstvou edz.

Tabulka 1: Použité rozměry geometrie.

parametr	rozměr [m]	parametr	rozměr [m]	parametr	rozměr [m]
box_length	400	borehole_length	300	main_tunnel_width	5.5
box_width	100	borehole_distance	25	main_tunnel_radius	3.5
box_height	100	borehole_radius	1.1	lateral_tunnel_length	23
edz	2	main_tunnel_length	100	lateral_tunnel_width	5
				lateral_tunnel_radius	3

V současném stavu zahrnuje geometrie modelu výřez masivu úložiště s jednou hlavní a třemi bočními rozrážkami, na které navazují horizontální ukládacími vrty. Vlastní objemy rozrážek a vrtů nejsou součástí výpočetní sítě (tvoří prázdný prostor v masivu). Rozměry modelované oblasti a jejich částí (viz obr. 2) jsou volitelnými parametry. Použité rozměry rozrážek odpovídají předpokládaným skutečným rozměrům. Tloušťka EDZ (2 m) je v současné verzi nadhodnocena z důvodu snazší diskretizace<sup>1</sup>.

K tvorbě sítě je využita knihovna BGEM (vlastní vývoj) zpřístupňující procedury programového rozhraní balíku GMSH [4].

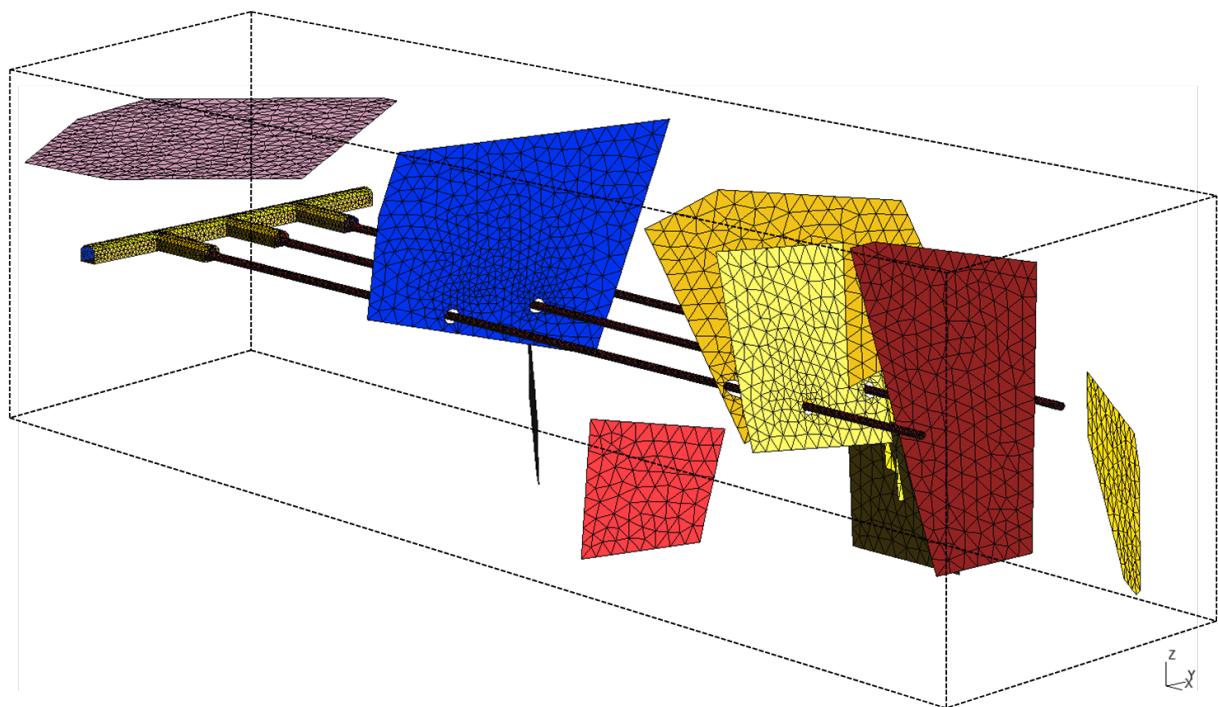
Celý proces zatím nebyl odladěn tak, aby vysítování oblasti bylo dostatečně robustní. Úspěšnost sítování (s parametry v tabulce 2) geometrie pro různé varianty stochasticky generované pukli-

<sup>1</sup>Současná verze geometrie modelu se potýká s několika nedostatkami. Východiska a plán dalších prací jsou diskutovány samostatně v odstavci 3.5 na konci této kapitoly.

nové sítě o několika desítkách puklin se pohybovala pouze okolo 10-20 % (viz odst. 3.5). K výpočtům byly použity geometrie s cca 10 puklinami o velikosti mezi 400 - 500 tis. elementy.

Tabulka 2: Parametry pro řízení kroků sítě.

parametr	maximální velikost [m]
fracture_mesh_step	5
boundary_mesh_step	20
borehole_mesh_step	0.8
main_tunnel_mesh_step	1.5



Obrázek 3: Geometrie modelu se stochasticky generovanou puklinovou sítí (bez zobrazené edz).

### 1.1.1 Okrajové podmínky

1. hydraulické OP ([3], str. 28):

- nulový tok přes vnější hranice vrtů,
- nulový tok přes hranice tunelu a rozrážek (počítá se se zalitím stěn rozrážek pryskyřicí a následným vybetonováním rozrážek),
- tlaková výška na vnější hranici modelované oblasti převzatá z regionálního modelu

2. transportní OP ([3], str. 31):

- zadaný tok koncentrace  $\sigma_c$  [ $kg.m^{-2}.s^{-1}$ ] přes (části) vnější hranice vrtů,

T A

Č R

## 1 POPIS MODELU

- nulová koncentrace a nulový tok koncentrace přes hranice tunelu a rozrážek,

Transportní úloha je řešena nespojitou Galerkinovou metodou (viz [3], str. 46), implementovanou v balíku Flow123d [2].

## 2 Testovací úlohy

Testovací úlohy měly mj. prokázat přenositelnost vnějších (hydraulických) a vnitřních (transportních) okrajových podmínek (OP) z externích modelů:

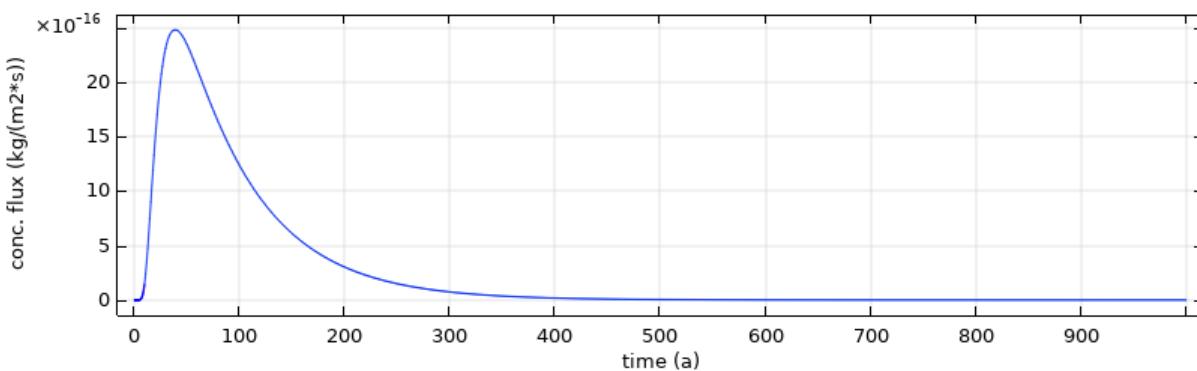
- Hydraulické OP na hranici oblasti byly převzaty z modelu lokality Hrádek [1]. Na obrázku 5 je znázorněno rozložení piezometrické výšky v předpokládané úrovni úložiště a vyznačena poloha geometrie (s rozměry box\_length a box\_width).
- Jako zdrojový člen kontaminace je zadán tok koncentrace kontaminantu v čase na povrchu (části<sup>2</sup>) úložného vrtu.

Byly spočteny úlohy se třemi variantami OP:

1. Konstantní zdroj  $\sigma_c = 10^{-6} \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$  na části prostředního vrtu o délce 10 m (odpovídající jednomu kontejneru) po celou dobu simulace.
2. Konstantní zdroj  $\sigma_c = 10^{-6} \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$  na všech vrtech s "vypnutím" po 10 letech (pak  $\sigma_c = 0$ ).
3. Proměnný zdroj na všech vrtech: hodnoty toku koncentrace kontaminantu převzaty z modelu blízkého pole pro  $^{129}\text{I}$  (viz obr. 4).

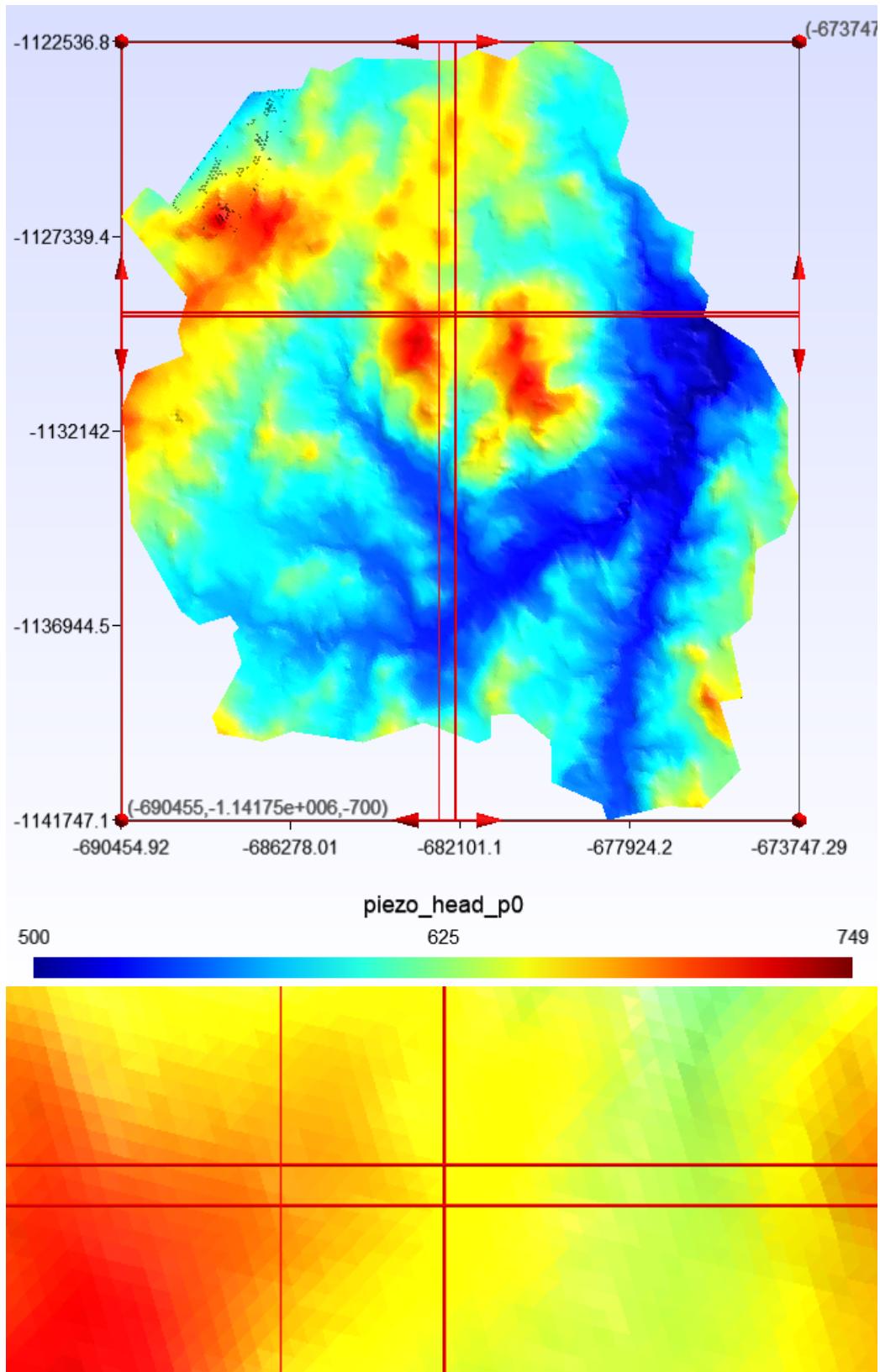
Tabulka 3: Použité hodnoty hydraulické vodivosti a porozitý.

oblast	konduktivita [ $\text{m}^{-1}$ ]	porozita [1]
masiv	$10^{-8}$	0.01
pukliny	$10^{-7}$	1
edz	$10^{-7}$	0.1



Obrázek 4: Časový průběh (prvních 500 let) hmotnostního toku izotopu  $^{129}\text{I}$  z bentonitové vrstvy kolem jednoho kontejneru.

<sup>2</sup>Toto je jeden z nedostatků současné verze modelu, Flow123d zatím neumí pracovat s časově proměnnou OP na části geometrie zadané souřadnicemi (viz odstavec 3.5).



Obrázek 5: Nahoře: pozice geometrie modelu (části úložiště) v rámci regionálního hydrogeologického modelu. Dole: detailní výřez; lze rozeznat jednotlivé elementy regionálního modelu (jejich velikost je cca 40 m).

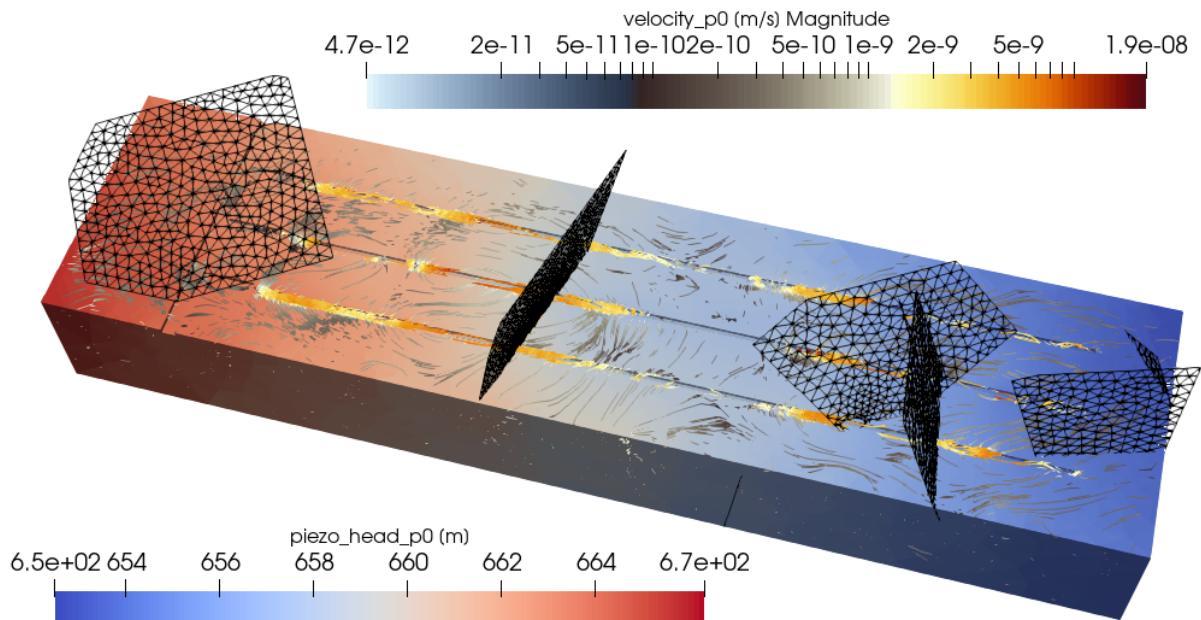
### 3 Výsledky, diskuze

V další části textu je vždy uveden reprezentativní výběr obrázků k dané úloze. Víc obrázků je potom uvedeno v Příloze. Kromě rozložení koncentrace v masivu sledujeme také průběh maximální koncentrace na vnější hranici (úložiště).

Varianty testovacích úloh slouží především pro otestování výpočetních možností a základní ověření správnosti fyzikálního modelu. Vstupní parametry, především materiálové vlastnosti hornin či zdrojové členy kontaminace, si v současné fázi nekladou za cíl být plně relistickými (snad kromě Varianty 3).

#### 3.1 Hydraulická úloha

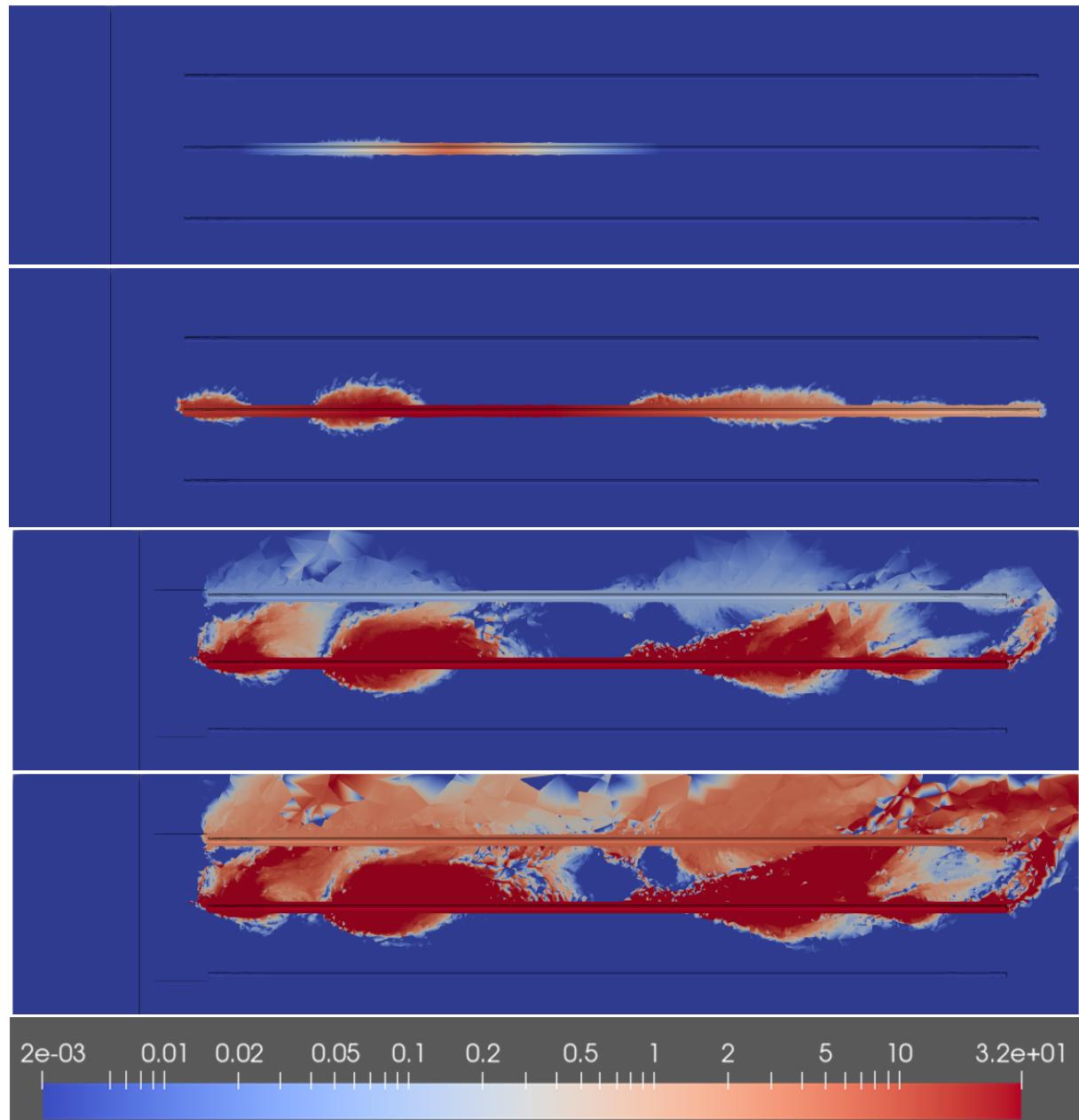
Všechny varianty testovacích úloh mají shodné rozložení hydraulického pole na oblasti. Hodnoty na hranici jsou rovny hodnotám z regionálního modelu (viz dolní detail na obr. 5). Na obr. 6 je v horizontálním řezu oblasti (se zobrazenými puklinami) znázorněno rozložení piezometrické výšky spolu s rychlostním polem. Dle předpokladů dochází k většinovému proudění v edz kolem vrtů, a zřetelný je též drenážní vliv puklin.



Obrázek 6: Rozložení piezometrické výšky a pole rychlostí na modelované oblasti. Horizontální řez s puklinami. Je zřetelný vliv puklin na rychlosť a rozloženie pole proudění.

### 3.2 Varianta 1

Na (viz obr. 7)<sup>3</sup> jsou v horizontálních řezech oblastí znázorněna rozložení pole koncentrací v různých časech simulace. V souladu s předpokladem probíhá šíření kontaminantu přibližně "SV" směrem, tj. ve směru převládajícího gradientu tlakové výšky, přičemž edz advekci zřetelně napomáhá.

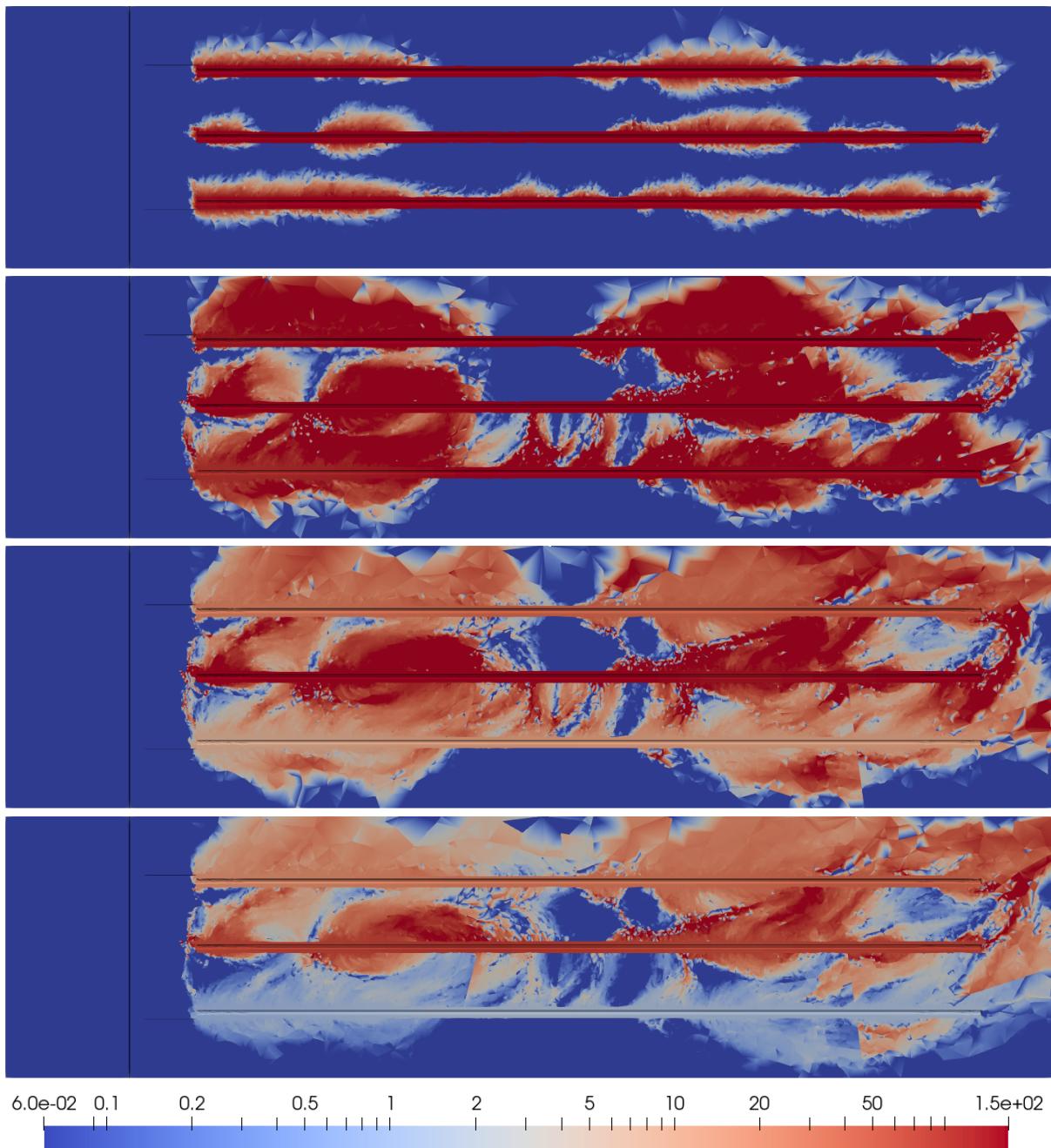


Obrázek 7: Prostorové rozložení koncentrace izotopu  $^{129}I$  v různých časech, odshora: 3 týdny, 3 roky, 20 let, 300 let;  $[kg.m^{-3}]$ . Varianta 1 ,horizontální řez oblastí.

<sup>3</sup>Vyznění barevného zobrazení je do jisté míry ovlivněno numerickými oscilacemi. Podrobněji je problematika rozebrána u výsledků Variantu 2.

### 3.3 Varianta 2

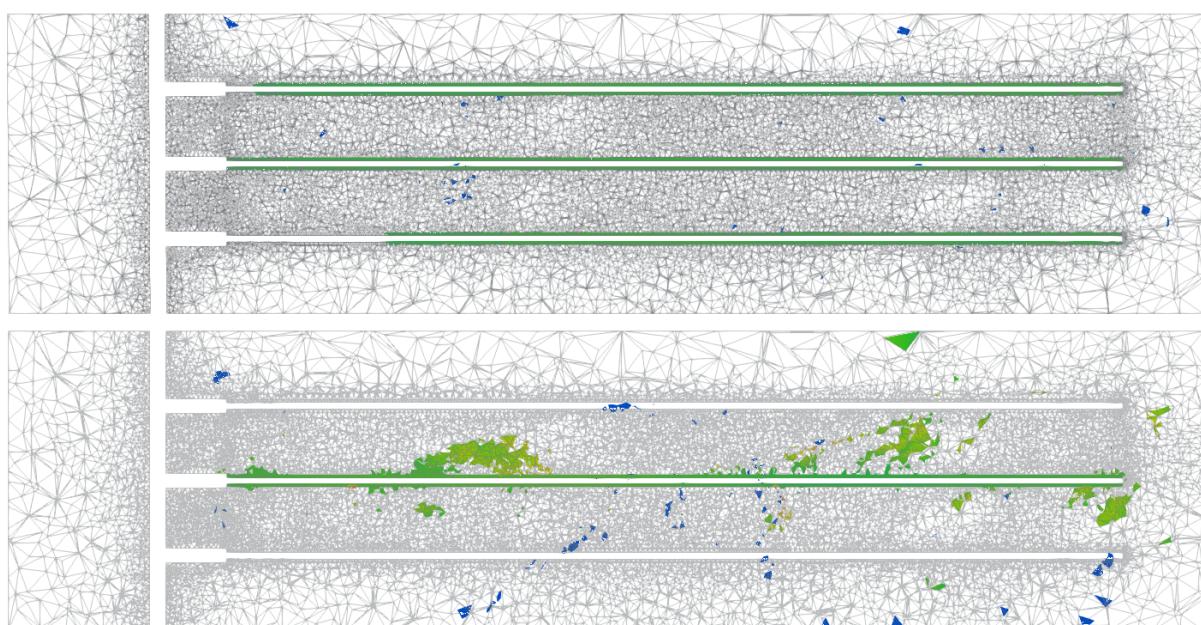
Přes rozdíly ve zdrojovém členu kontaminace oproti variantě 1 (tok kontaminace na povrchu všech vrtů) probíhá šíření kontaminace (viz obr. 8) podobně jako u varianty 1. Stejně tak vymývání kontaminace po vypnutí zdroje probíhá podobně "SV" směrem, se zřetelným vlivem puklin (jakési "tišiny" za puklinami), viz dolní dva řezy na obr. 8.



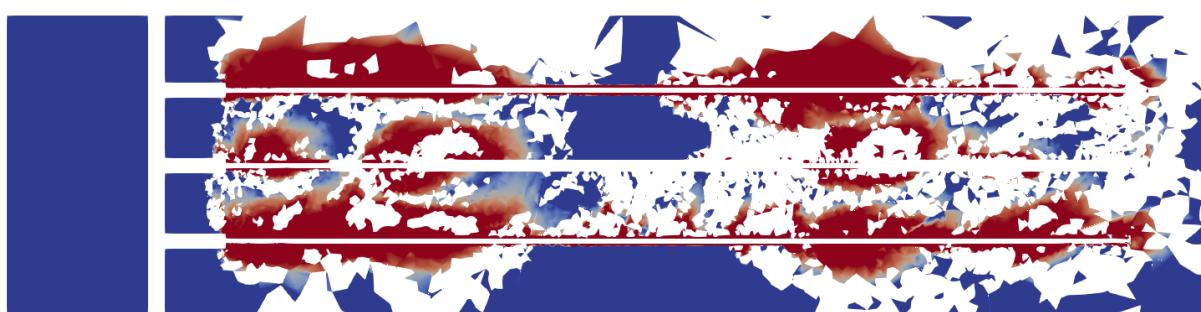
Obrázek 8: Prostorové rozložení koncentrace izotopu  $^{129}\text{I}$  v různých časech, odshora: 1, 20, 50, 160 let;  $[\text{kg.m}^{-3}]$ . Varianta 2, horizontální řez oblastí.

### 3.3.1 Numerické oscilace

Jak již bylo zmíněno u varianty 1, na hodnoty koncentrace - a potažmo na vizualizace (viz obr. 10) - má vliv numerických oscilací, kdy především na čele vlny šíření kontaminace se nacházejí nerealisticky vysoké hodnoty koncentrace (a naopak dále v masivu dochází k výskytu záporných koncentrací). Zřetelné je to při "rozjezdu" simulace (obr. 9 nahoře), ovšem reliktы těchto oscilací zůstávají i delší dobu (obr. 9 dole či obr. 20 v Příloze), a především pak mohou ovlivnit vyhodnocení maximálních či průměrných koncentrací na hranici oblasti (viz sytě zelený element u horní hranice na obr. 9 dole).



Obrázek 9: Vliv numerických oscilací na postprocessing. Odstíny zelené odpovídají hodnotám koncentrace větším než ve zdroji, odstíny modré odpovídají záporným koncentracím. Nahoře: čas 1 rok, dole: 40 let. Varianta 2.



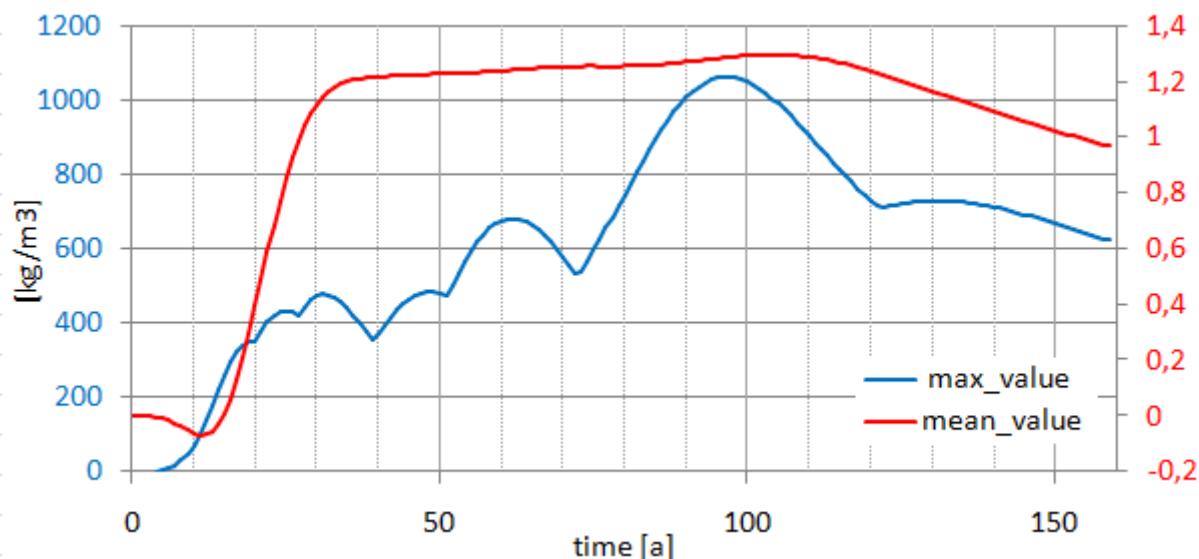
Obrázek 10: Rozložení koncentrace v čase 10 let s hodnotami bez záporných a 10% nejvyšších hodnot.

### 3.3.2 Hodnoty koncentrace na hranici oblasti

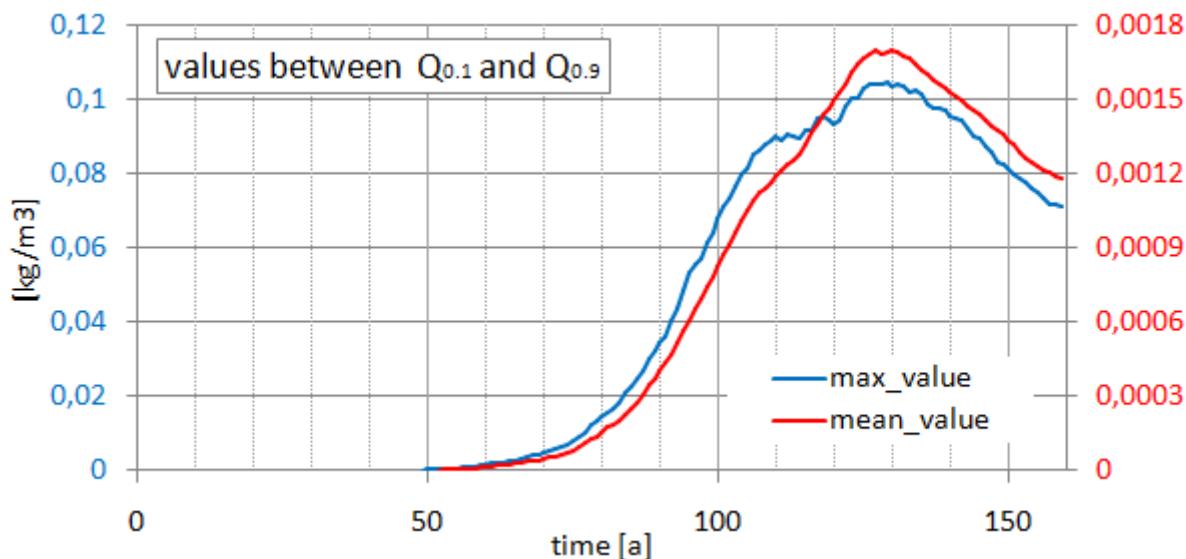
Časový průběh (maximální či průměrné) koncentrace na vnější hranici úložiště je jedním z klíčových parametrů pro bezpečnostní analýzu úložiště. Jak bylo uvedeno výše, správné vyhodnocení může být negativně ovlivněno numerickými oscilacemi. Ty mohou v některých uzlech nabývat až o několik (i desítek) řádů vyšších absolutních hodnot.

Pro připomenutí uvádíme, že zdrojový člen byl konstantní mezi 0-10 lety, poté byl nulový. V grafu na obr. 11 jsou vyneseny časové průběhy maximální koncentrace na hranici oblasti a její střední hodnoty pro všechna spočtená data. Kromě nereálně vysokých hodnot koncentrací či záporných středních hodnot pro prvních 10 let simulace je výrazný především kopcovitý charakter křivky maximálních hodnot, který (vzhledem k časovému rozsahu i rozdílem hodnot) nelze vyvětlit tak, že by na hranici přicházely vlny kontaminace po různých preferenčních cestách.

Odstraníme-li z množiny hodnot koncentrací na hranici horních a dolních např. 10% hodnot (tj. vezmeme jen hodnoty ležící mezi kvantily 0.1 a 0.9), dostaneme křivku s mnohem lepší vypovídací hodnotou (viz obr. 12). Maximální odezva na hranici nastává po cca 120 letech od začátku simulace, a to jak podle křivky maximálních hodnot, tak podle středních hodnot koncentrace. Chování křivky maximálních hodnot na obr. 12 mezi lety 110-130 již lze odůvodnit postupným spojováním vln kontaminace z jednotlivých vrtů v "SV" rohu řezu oblasti. Této hypotéze by odpovídalo i zpomalení růstu střední hodnoty.



Obrázek 11: Varianta 2 - časový průběh koncentrace na hranici oblasti (modře: maximální hodnoty, červeně: střední hodnoty).

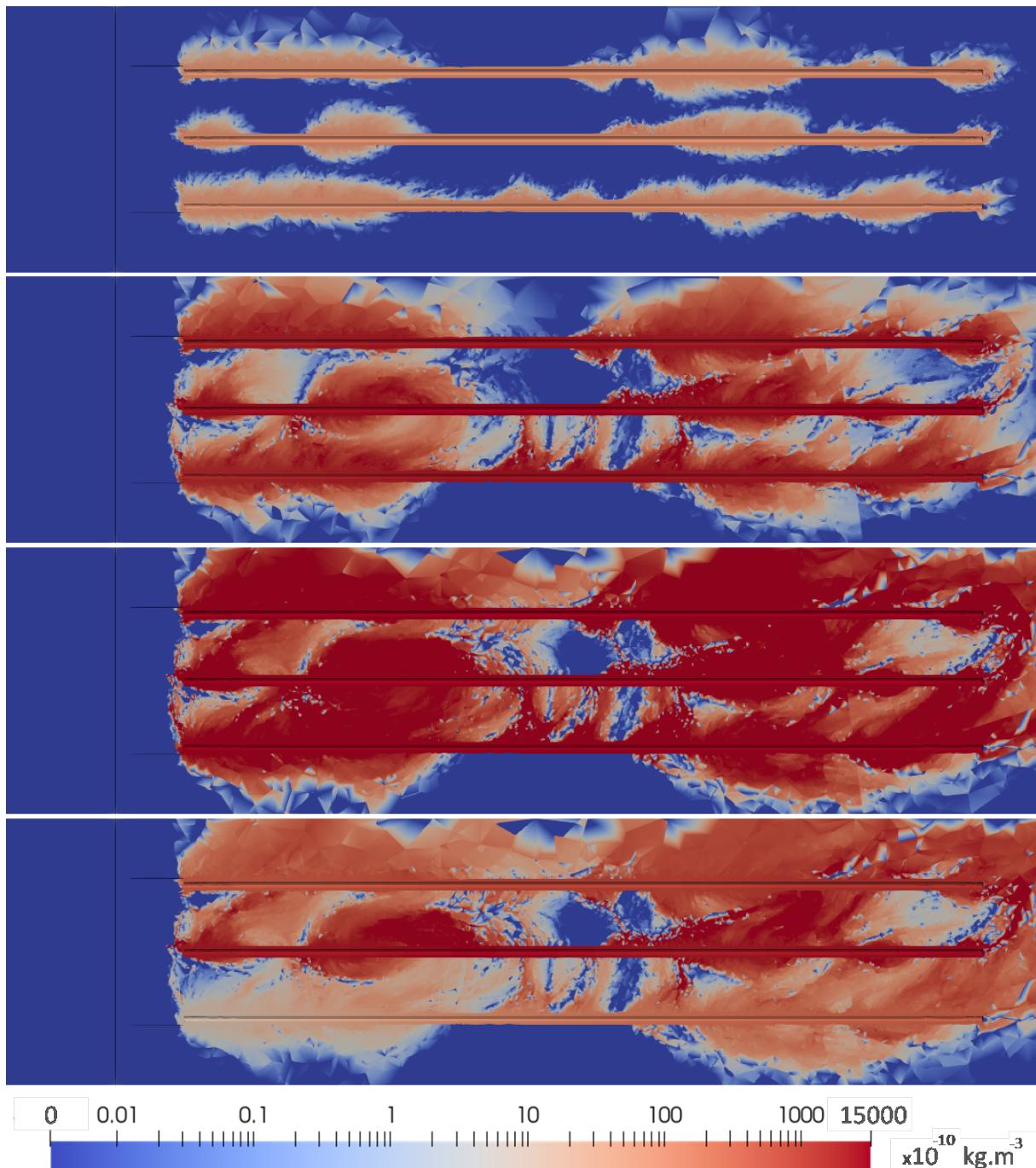


Obrázek 12: Varianta 2 - časový průběh koncentrace na hranici oblasti (modře: maximální hodnoty, červeně: střední hodnoty). Z množiny dat v každém kroku odstraněno dolních a horních 10% hodnot.

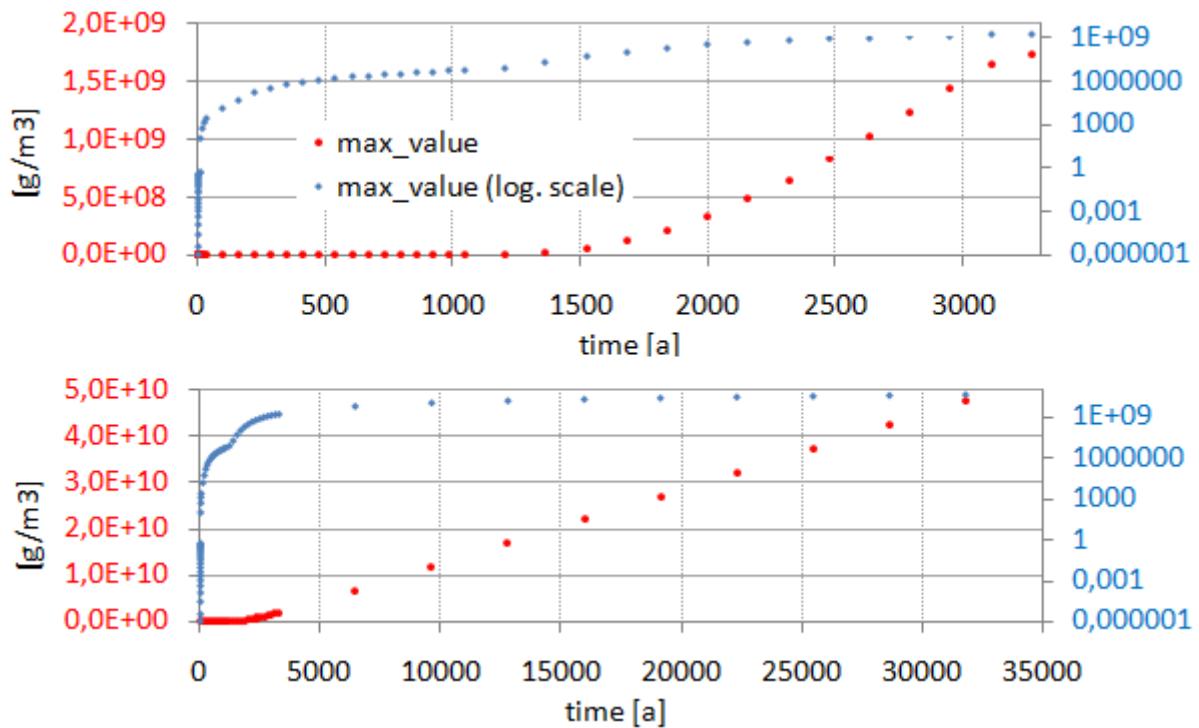
### 3.4 Varianta 3

Charakter zdroje kontaminace v této variantě již odpovídá reálné situaci postupného uvolňování radionuklidu  $^{129}I$  z kontejneru a jeho prostupu bentonitovou vrstvou. Po prvním nárůstu v řádu několika desítek let dochází poté k postupnému poklesu v řádech tisíců let.

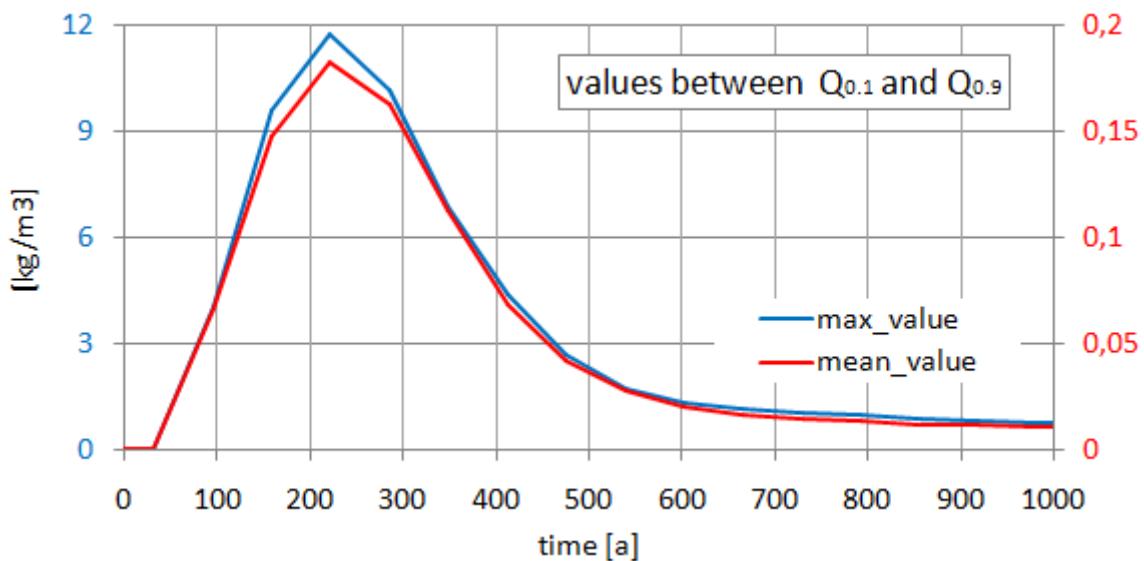
Vybrané časy simulace jsou znázorněny na obr. 13. Charakter šíření kontaminace odpovídá variantě 2, pouze fáze vymývání je mnohem pozvolnější. Výsledky delší simulace než 1000 let nejsou prezentovány, neboť při prodloužení časového kroku numerické oscilace naprostě znehodnotily výsledky, což je zřejmé i z grafu maximálních nefiltrovaných hodnot koncentrace na hranici oblasti (viz obr. 14). Naproti tomu po ořezání dat o 10% nejnižších a nejvyšších hodnot již časový vývoj maximální a průměrné koncentrace odpovídá očekávání, s maximální odezvou po cca 180 letech od maxima zdrojového členu.



Obrázek 13: Prostorové rozložení koncentrace izotopu  $^{129}I$  v různých časech, odhora: 6 let, 19 let, 95 let, 1046 let;  $[kg.m^{-3}]$ . Varianta 3, horizontální řez oblastí.



Obrázek 14: Varianta 3 - časový průběh koncentrace na hranici oblasti (modře: maximální hodnoty, červeně: střední hodnoty).



Obrázek 15: Varianta 3 - časový průběh koncentrace na hranici oblasti (modře: maximální hodnoty, červeně: střední hodnoty). Z množiny dat v každém kroku odstraněno dolních a horních 10% hodnot.

### 3.5 Současná verze modelu - nedostatky a možná řešení

Jak již bylo uvedeno v předchozím textu, současná verze modelu transportu se potýká s několika problémy, jejichž řešení však zároveň poskytuje prostor pro další rozvoj modelu. První dva mají společný jmenovatel ve využití knihoven síťovacího algoritmu GMSH [4] v našem kódu.

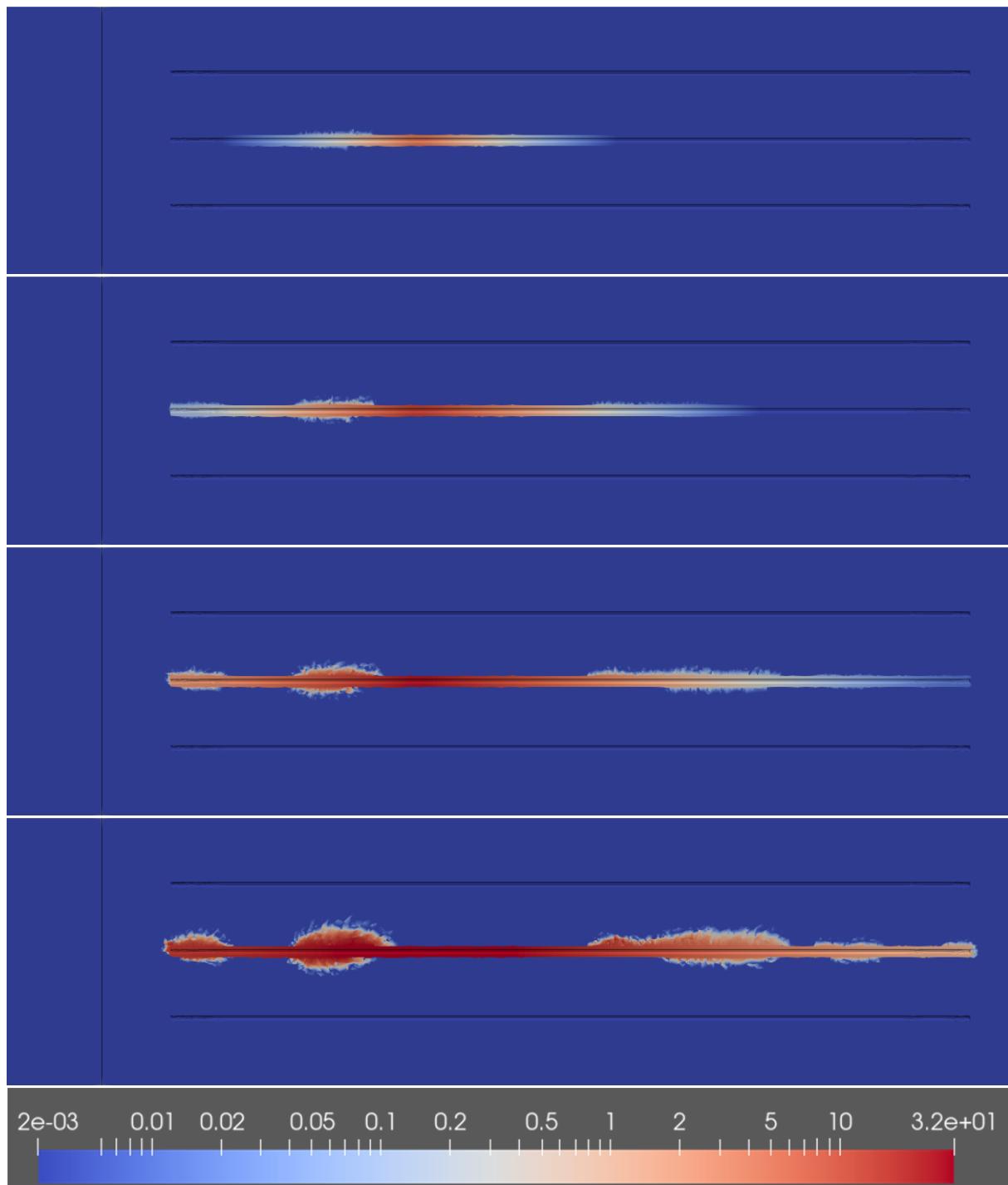
- **Reprezentace EDZ.** Je třeba nalézt způsob lepší reprezentace EDZ buďto specificky zjemněnou síti, přepočtem efektivní vodivosti, nebo rozdělením modelu na dvě samostatné škály.
- **Stabilita síťování.** Současné řízení kroku sítě vynucuje velká krok na celých puklinách což způsobuje neúspěch síťovače pro složitější průniky. Je třeba najít vhodný způsob precizního určování velikosti kroku sítě na různých částech geometrie.
- **Numerické oscilace** zatěžují určení maximální koncentrace na hranici značnou chybou. Bude třeba optimalizovat parametry numerického schématu s ohledem na omezení oscilací při současném zachvání nízké numerické difúze.
- **Nastavení OKP.** Použitá verze Flow123d neumožňuje současně volit prostorově proměnnou okrajovou podmínu v kombinaci s časovou řadou zadanou ze souboru. Bude použita novější verze, která toto umožňuje.

## Reference

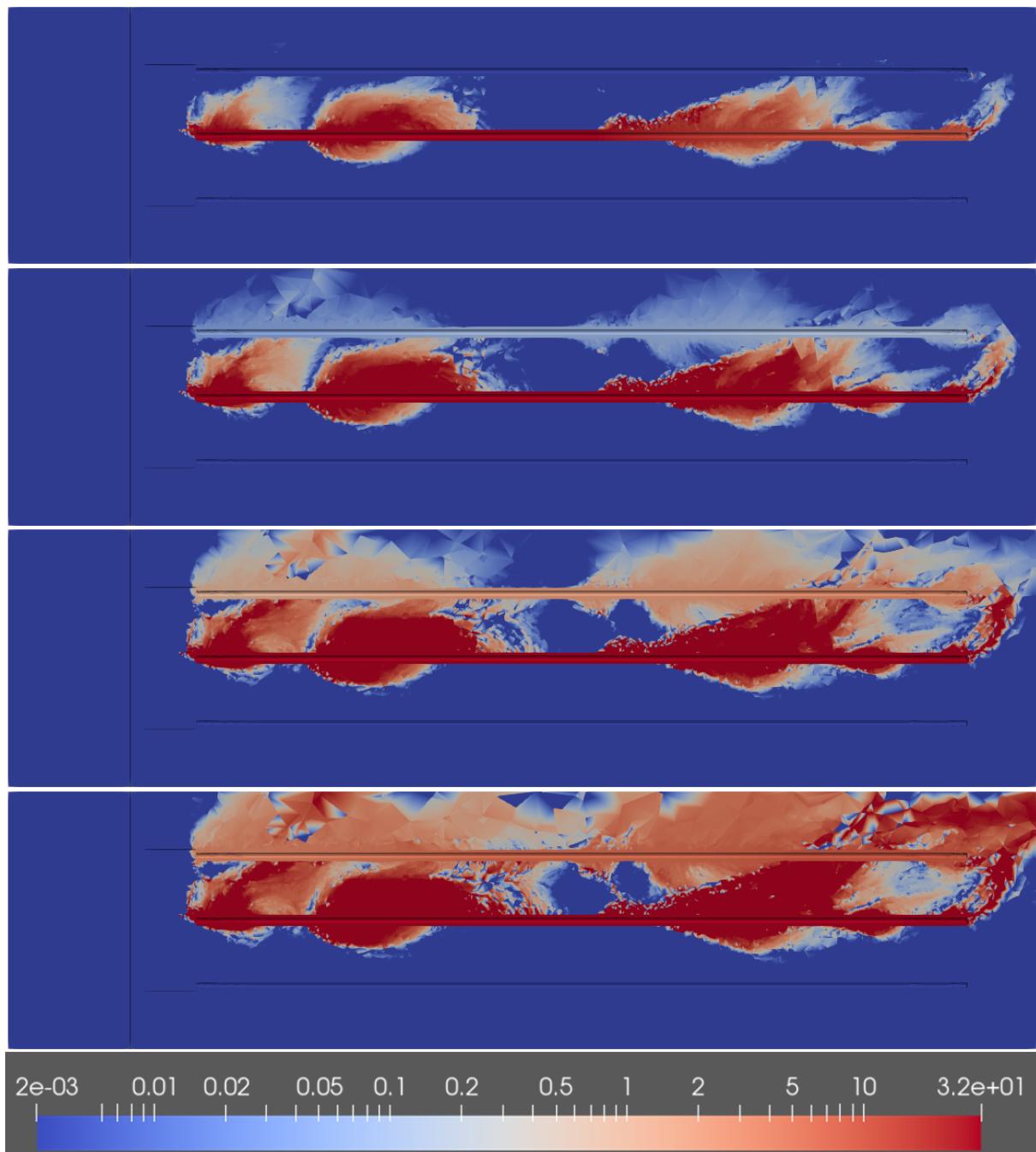
- [1] J. Baier, J. Královcová, J. Uhlík, M. Milický, L. Gvoždík, J. Chudoba, J. Říha, and L. Ručavičková. Hydrogeologické modely horninového prostředí pro hlubinné úložiště; pasport detailního modelu – lokalita Hrádek. *Technická zpráva SÚRAO 341/2018*, 2018.
- [2] Jan Březina, Jan Stebel, Pavel Exner, and Jan Hybš. Flow123d. <http://flow123d.github.com>, repository: <http://github.com/flow123d/flow123d>, 2011–2016.
- [3] Jan Březina, Jan Stebel, David Flanderka, Pavel Exner, and Jan Hybš. Flow123d, version 2.2.1 User Guide and Input Reference, repository: [https://flow.nti.tul.cz/packages/2.2.1\\_release/flow123d\\_2.2.1.doc.pdf](https://flow.nti.tul.cz/packages/2.2.1_release/flow123d_2.2.1.doc.pdf). 2018.
- [4] C. Geuzaine and J.-F. Remacle. Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(11):1309–1331, 2009.

## 4 Obrazová příloha

### 4.1 Varianta 1

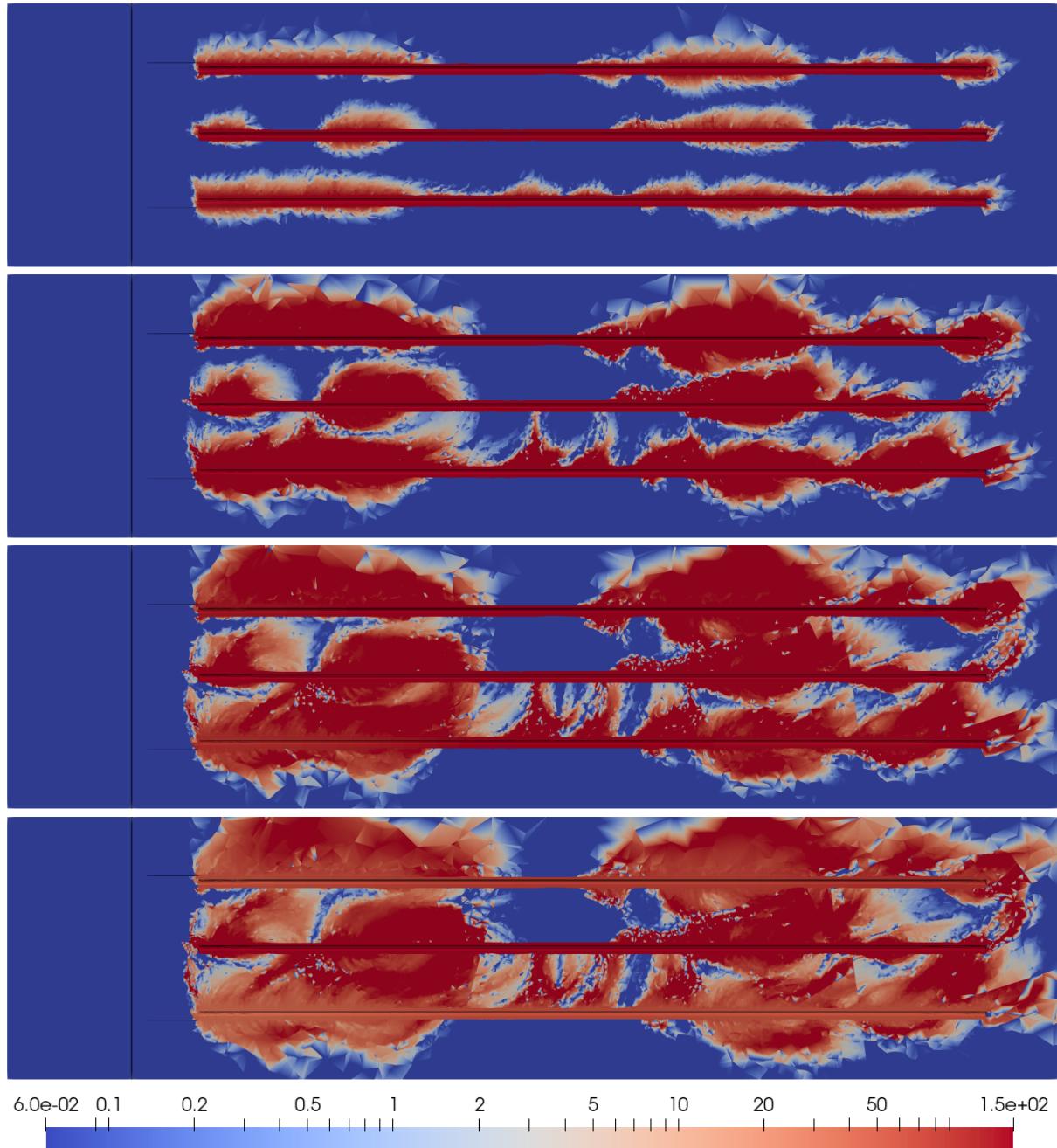


Obrázek 16: Prostorové rozložení koncentrace izotopu  $^{129}I$  v různých časech, odshora: 3 týdny, 4 měsíce, 1 rok, 3 roky;  $[kg.m^{-3}]$ . Varianta 1, horizontální řez oblastí.

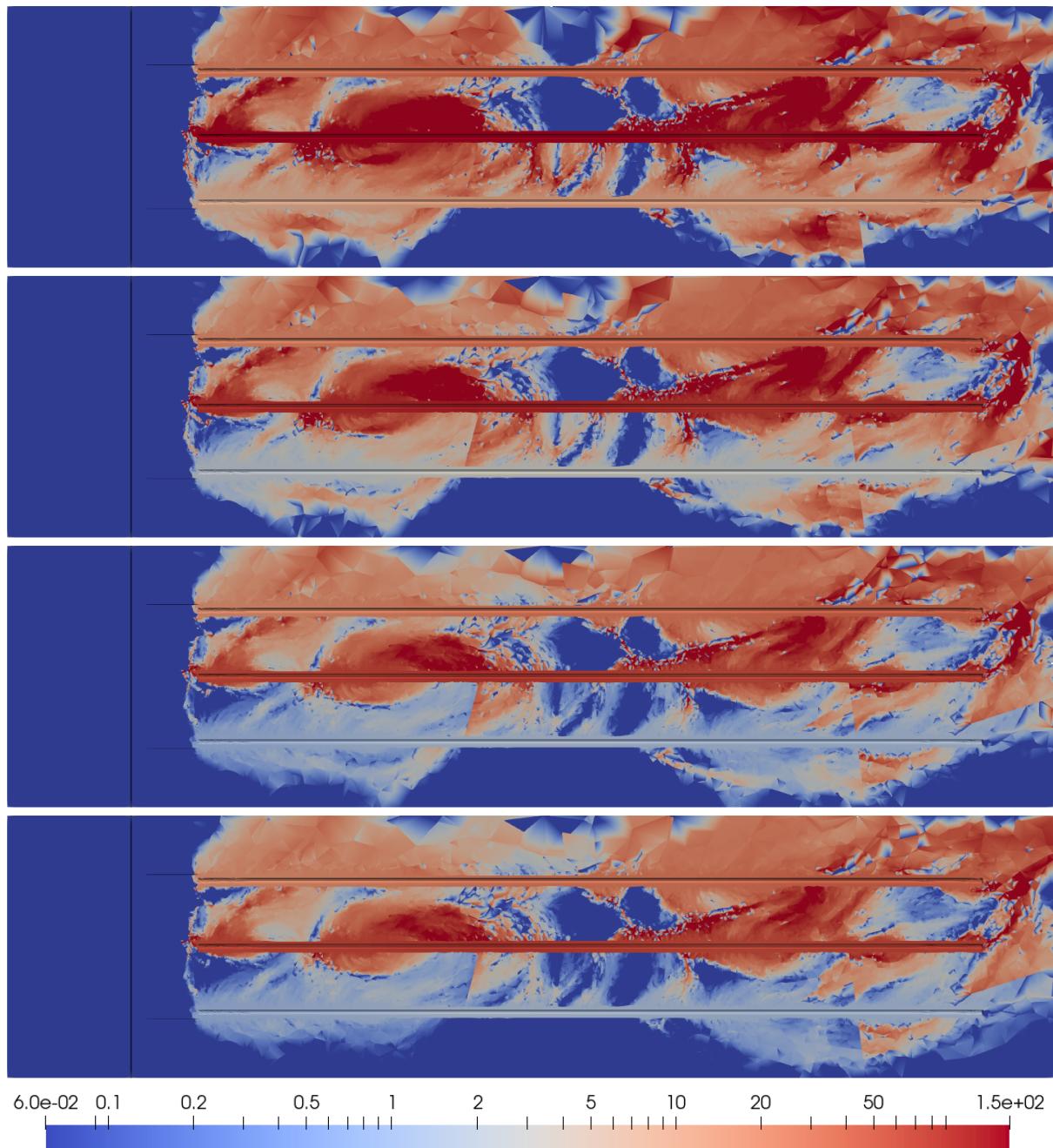


Obrázek 17: Prostorové rozložení koncentrace izotopu  $^{129}I$  v různých časech, odshora: 6 let, 20 let, 50 let, 300 let;  $[kg.m^{-3}]$ . Varianta 1, horizontální řez oblastí.

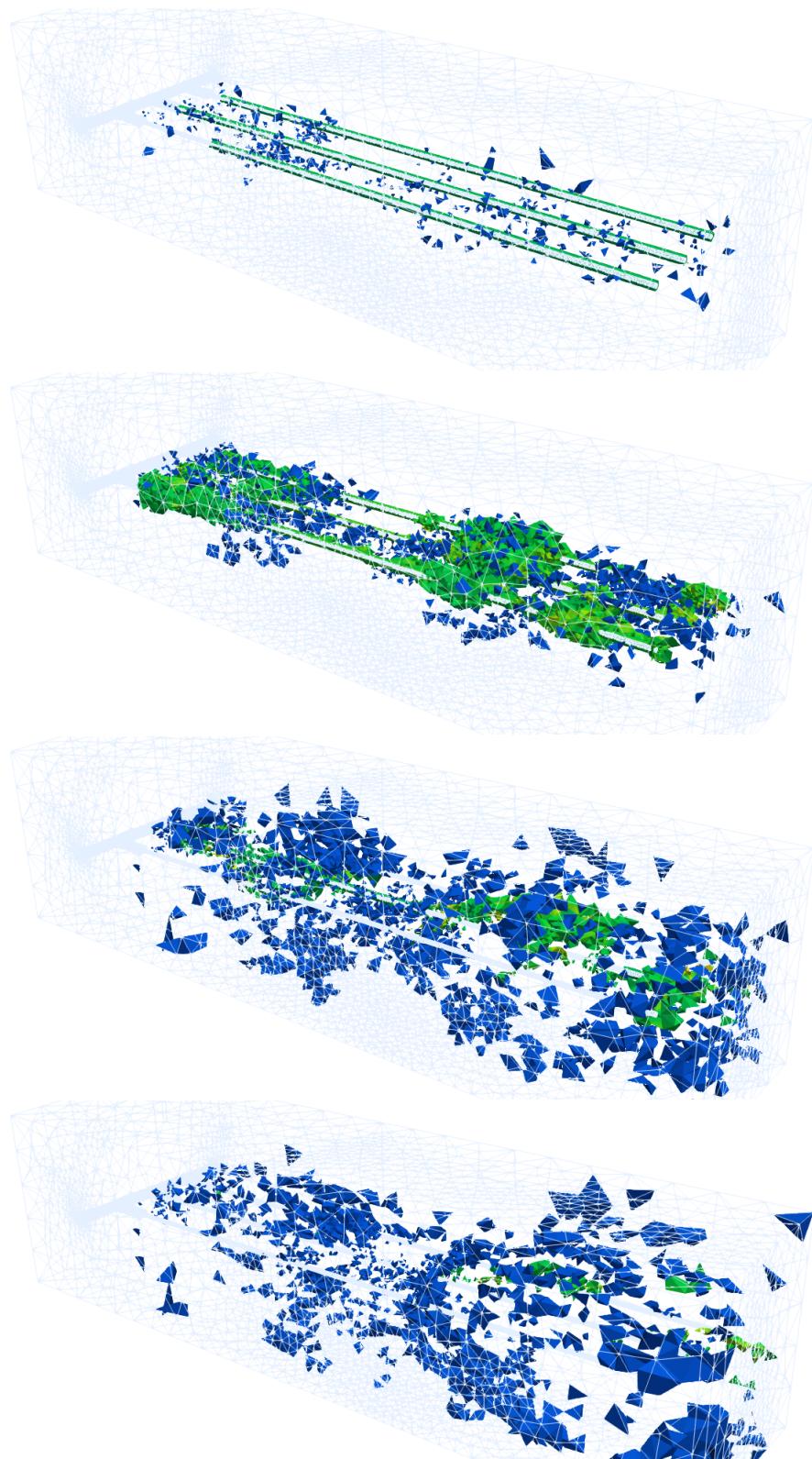
## 4.2 Varianta 2



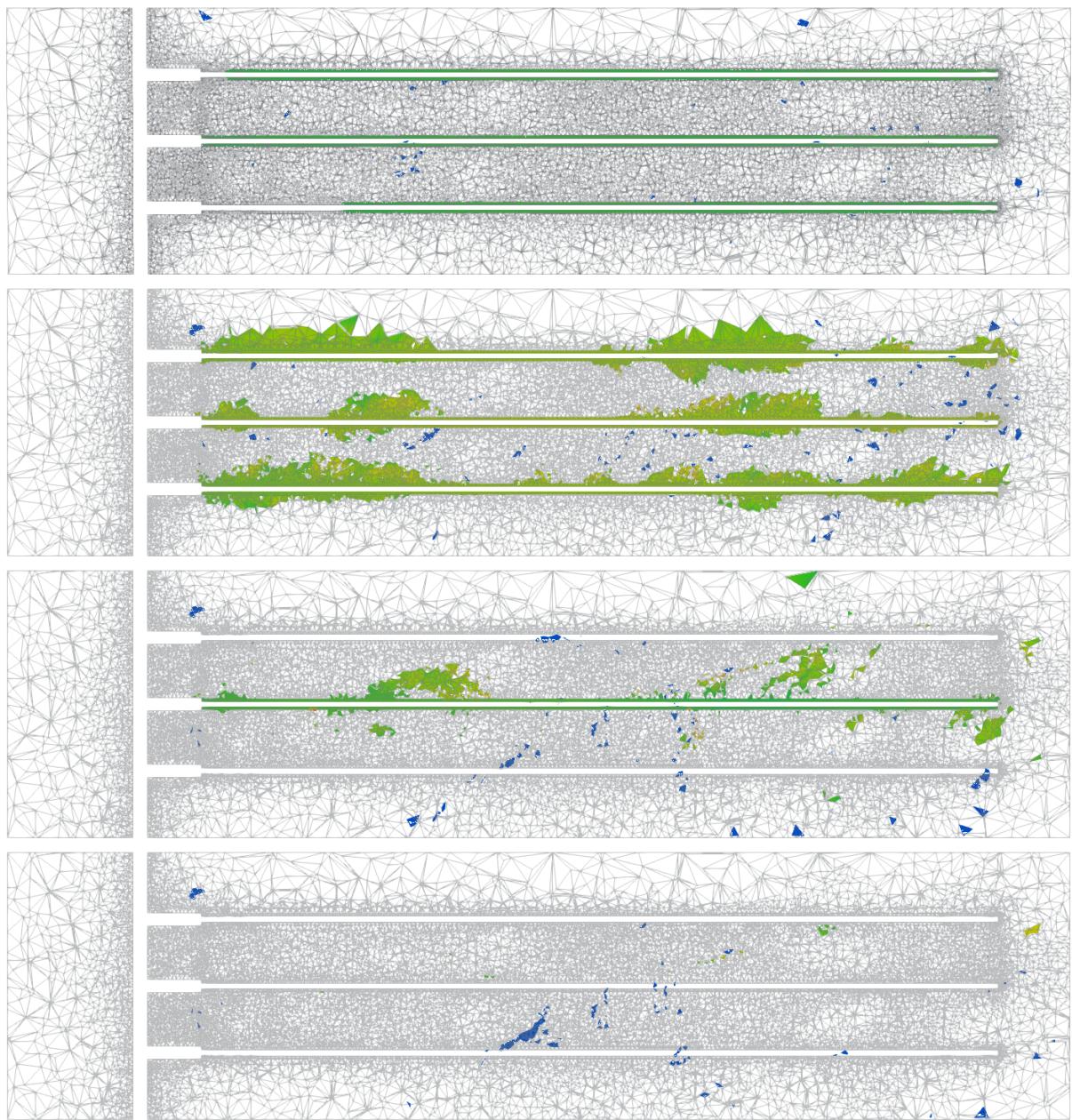
Obrázek 18: Prostorové rozložení koncentrace izotopu  $^{129}\text{I}$  v různých časech, odshora: 1, 10, 20, 30 let;  $[\text{kg.m}^{-3}]$ . Varianta 2, horizontální řez oblastí.



Obrázek 19: Prostorové rozložení koncentrace izotopu  $^{129}I$  v různých časech, odshora: 50, 70, 100, 160 let; [ $kg.m^{-3}$ ]. Varianta 2, horizontální řez oblastí.

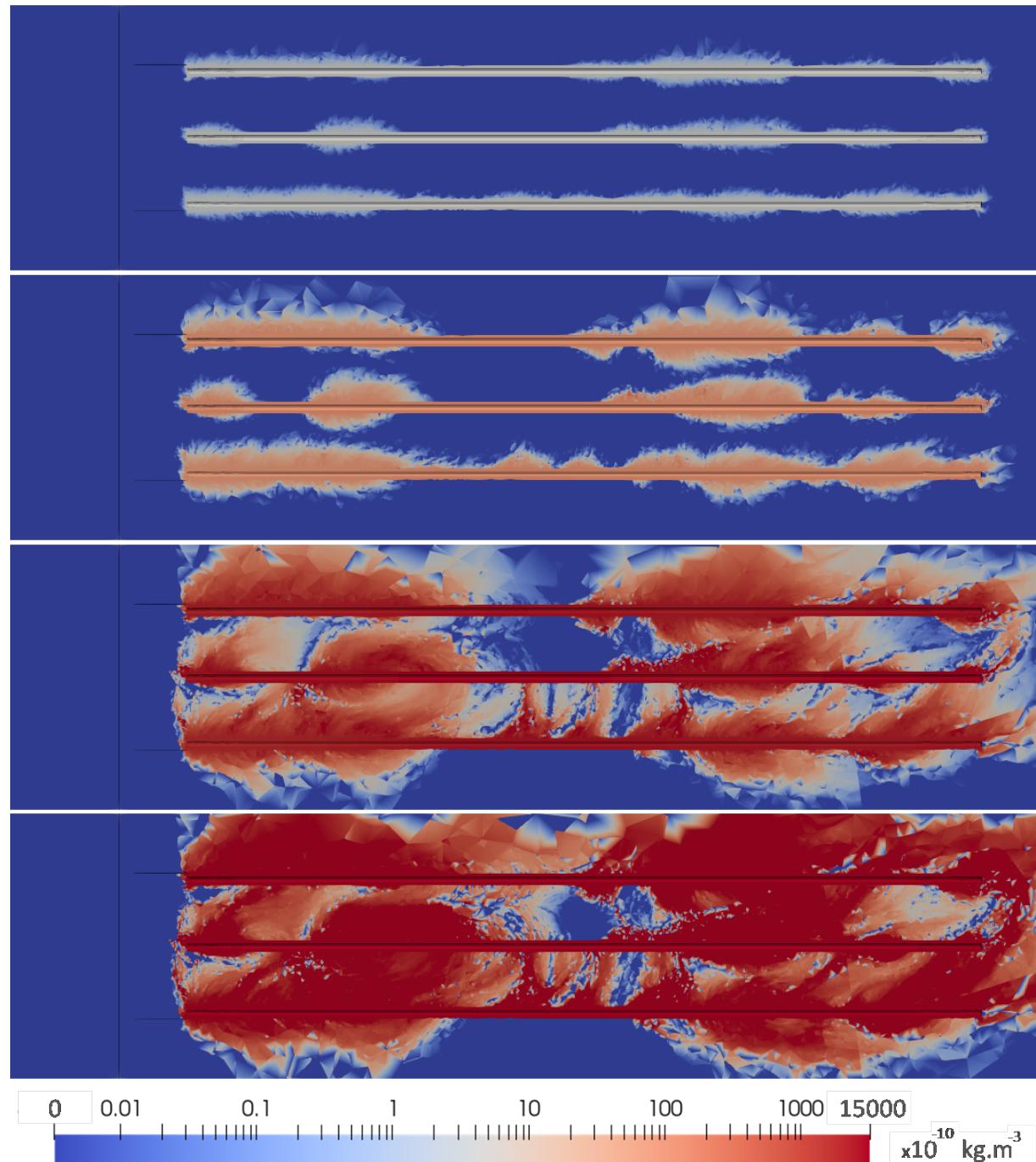


Obrázek 20: Vliv numerických oscilací na postprocessing. Odstíny zelené odpovídají hodnotám koncentrace větším než ve zdroji, odstíny modré odpovídají záporným koncentracím. Od shora v časech: 1, 10, 50, 150 let. Varianta 2.

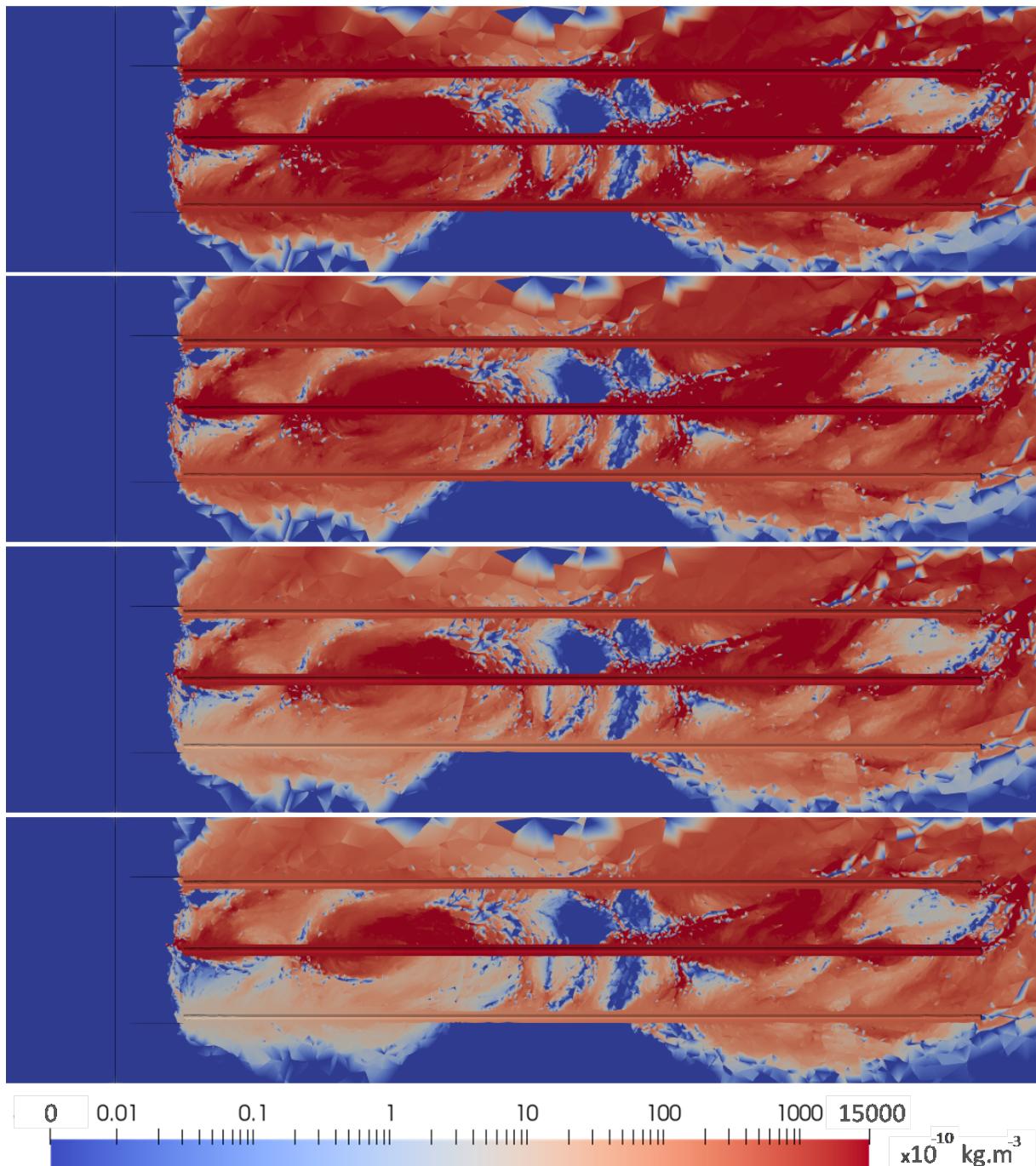


Obrázek 21: Vliv numerických oscilací na postprocessing. Odstíny zelené odpovídají hodnotám koncentrace větším než ve zdroji, odstíny modré odpovídají záporným koncentracím. Odhora v časech: 1, 10, 40, 150 let. Varianta 2.

## 4.3 Varianta 3



Obrázek 22: Prostorové rozložení koncentrace izotopu  $^{129}\text{I}$  v různých časech, odshora: 1 rok, 6 let, 19 let, 95 let;  $[\text{kg.m}^{-3}]$ . Varianta 3, horizontální řez oblastí.



Obrázek 23: Prostorové rozložení koncentrace izotopu  $^{129}I$  v různých časech, odshora: 158 let, 222 let, 285 let, 1046 let;  $[kg.m^{-3}]$ . Varianta 3, horizontální řez oblastí.