

# Řešení benchmarkové úlohy transportu látky v diskretní puklinové síti

*M. Hokr, J. Havlíček*

Technická univerzita v Liberci

## 1 Úvod

Téma článku vychází z potřeb studia vlastností horninového prostředí pro hodnocení bezpečnosti hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva, hlavními výzvami pro matematické modelování v této oblasti jsou sdružené fyzikální procesy a složitost geometrické struktury prostředí.

Jedním z hlavních faktorů na bezpečnost úložiště izolační schopnost horniny, která je obvykle hodnocena přes její (ekvivalentní) hydraulickou vodivost, tj. celkový průtok vody přes určitý průřez. Skutečnou hodnocenou veličinou je ale rychlost průchodu rozpuštěných radionuklidů, která je sice pro porézní prostředí úměrná průtoku, ale pro nehomogenity typu puklin závisí na rozložení toku v objemu - rychle proudící „kanály“ proti méně vodivým puklinám s pomalým tokem. v této práci jsou na modelové úloze puklinové sítě určovány průnikové křivky a střední hodnota a rozptyl tzv. doby zdržení – srovnány jsou výpočty pomocí sledování částic (particle tracking) a pomocí rovnice advekčního transportu.

## 2 Popis úlohy a řešení

Úloha byla definována v projektu Decovalex [4], kde je tímto způsobem hodnocen vliv napjatosti na charakter toku a dobu zdržení částic. Výpočty navazují na dříve prezentované výpočty proudění pro různé stavy napjatosti [1, 2, 3], mimojiné i srovnáním způsobu hodnocení pomocí ekvivalentní vodivosti a pomocí rychlosti průchodu látky. V tomto textu se nezabýváme přímo vlivem napjatosti, jednotlivé varianty jsou chápány jako různé parametry puklinové sítě pro vyhodnocení proudění a transportu (v prezentaci bude popsáno v plném kontextu).

Geometrie úlohy je zadána seznamem 7797 puklin se souřadnicemi koncových bodů a velikostí rozevření (šířky) ve čtverci v rozsahu  $-10 < x < 10$ ,  $-10 < y < 10$ . Okrajové podmínky pro proudění jsou zadány hodnotami tlaku (Dirichlet) po celém obvodu nebo na protilehlé stěny tak, aby generoval konstantní gradient  $10^4$  Pa/m (dvě varianty: vodorovně zprava doleva a svisle shora dolů) – obrázek 1. Úloha transportu látky je zadána okamžitým pulsním vstupem (vtok daného celkového množství látky za velmi krátký čas) do všech puklin na přítokové straně modelového čtverce.

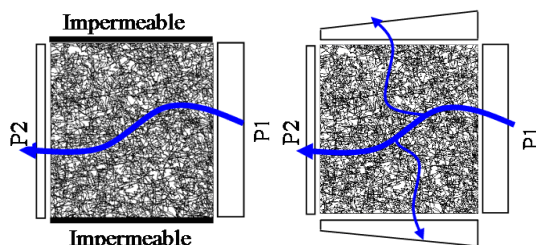
Úlohy proudění i transportu byly vypočteny softwarem FLOW123D vyvíjeným na pracovišti autorů [6]. Rovnice proudění je řešena smíšenou-hybridní metodou konečných prvků, jejíž výsledkem jsou diskretní toky jednotlivými puklinami. Segmenty puklin mezi průsečíky jsou zároveň elementy diskretizace (z důvodů linearity v 1D segmentech není další dělení potřebné). Rovnice advektivního transportu je řešena metodou konečných objemů, s upwind vážením a explicitními časovými kroky. Volba časových kroků je řízena CFL podmínkou. Doba zdržení je určena jako vážený průměr z času pro jednotlivé části hmoty (=váhy) na výstupu za každý časový krok výpočtu.

Srovnávací výpočty pomocí softwaru NAPSAC využívají standardní metodu konečných prvků pro proudění (srovnání např. z hlediska splnění bilance hmoty je provedeno v [3]) a výpočet transportu byl proveden pomocí metody sledování částic (particle tracking). Doba zdržení je přímo výsledkem výpočtu pro každou jednotlivou částici. Jednotlivé výsledky byly zpracovány autory výpočtů ve zprávách [7, 5].

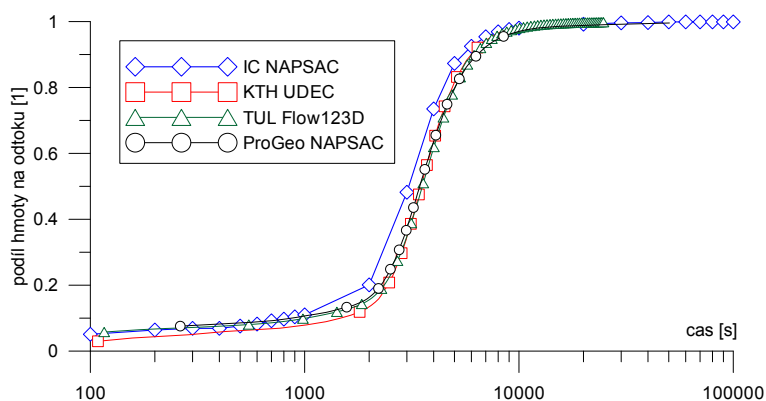
### 3 Výsledky

Výsledné průnikové křivky jsou určovány jako průběh v čase pro podíl hmoty (resp. počtu částic) proteklé odtokovými hranami modelového čtverce a celkové zadané hmoty (resp. počtu částic). Výsledky pro horizontální gradient jsou uvedeny na obrázku 2, kde jsou porovnány jednotlivé metody a softwary. Je vidět dobrá vzájemná shoda kromě výsledků IC. Zajímavým výsledkem je, že se ve sklonu křivky nijak neprojevuje numerická difuze z upwind metody (Flow123D) proti částicovým metodám (NAPSAC), což lze vysvětlit tím, že dominantním difuzním jevem je mísení roztoku resp. částic mezi různě „rychlými“ trajektoriemi v síti puklin.

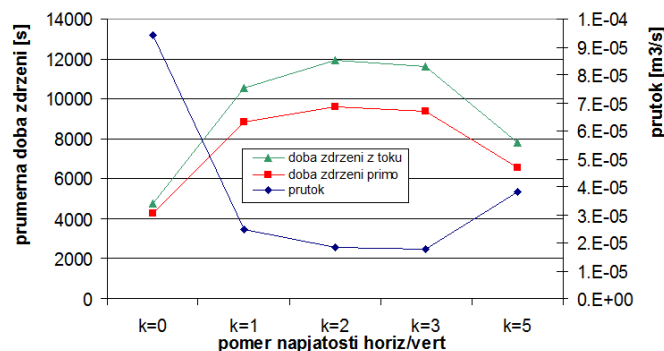
Na obr. 3 je další srovnání – hodnocení horniny přes celkový průtok a přes dobu zdržení (čas transportu). Jiný způsob vyjádření doby zdržení je možné dostat přímo z průtoku jako doba ideální výměny celkového objemu vody (celkový objem ku průtoku). Přestože tok se mění mezi jednotlivými variantami v mnohem vyšším poměru, obě vyjádření času zdržení dávají podobný průběh (mění se výrazně objem vody mezi variantami). Výsledky potvrzují předpoklad vzniku vodivých kanálů z několika konkrétních puklin, které i při snížení toku snižují dobu zdržení (tzv. channeling).



Obrázek 1: Schéma okrajových podmínek určujících tlakový gradient pro úlohu proudění – dvě varianty s propustnými nebo nepropustnými bočními stěnami.



Obrázek 2: Porovnání průnikových křivek (závislost hmoty na výstupu na čase) mezi jednotlivými modely a řešitelskými týmy Decovalex.



Obrázek 3: Porovnání doby zdržení (času transportu) určené přímo z výpočtu transportu a určené z celkového průtoku, proti průtoku samotnému, pro různé varianty parametrů puklin (vlivem napjatosti).

**Poděkování:** Tato práce byla realizována za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 v programu MŠMT Výzkumná centra a v rámci projektu č. FR-TI1/362 v programu MPO TIP. Dále byla financována SÚRAO, smlouva č. 2010/019/Slo.

Práce popsané v tomto článku byly provedeny v rámci mezinárodního projektu DECOVALEX (DEMONstration of COUPled models and their VALidation against EXperiments). Názory vyjádřené v tomto článku jsou však názory autorů a nemusí být nutně názory financujících organizací.

## Reference

- [1] A. Baghbanan, L. Jing: *Hydraulic properties of fractured rock masses with correlated fracture length and aperture*. Int. J. Rock Mech. Min. Sci. 44 (2007), pp. 704–719.
- [2] M. Hokr, J. Kopal, J. Havlíček: *Řešení úlohy proudění v rozsáhlé diskrétní síti puklin v kontextu sdružených úloh proudění-mechanika*, In: SNA'09 Modelling and Simulation of Challenging Engineering problems (Blaheta, Starý, eds.), Ústav geoniky AV ČR, Ostrava, 2009.
- [3] M. Hokr, J. Kopal, J. Březina, and P. Rálek: *Sensitivity of Results of the Water Flow Problem in a Discrete Fracture Network with Large Coefficient Differences*, In: I. Dimov, S. Dimova, and N. Kolkovska (Eds.): NMA 2010, LNCS 6046, pp. 420–427, 2011. Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2011
- [4] J. Hudson, L. Jing, I. Neretnieks: *Technical Definition of the 2-D BMT Problem for Task C*, DECOVALEX-2011 project, 5 May 2008
- [5] PROGEO s.r.o.: *Simulace transportu pomocí metody particle tracking*, Technická zpráva 2010
- [6] O. Severýn, M. Hokr, J. Královcová, J. Kopal, M. Tauchman: *Flow123D: Numerical simulation software for flow and solute transport problems in combination of fracture network and continuum*, Technical report, TU Liberec, 2008.
- [7] J. Hudson, L. Jing (eds.): *Task C: Integrated assessment of THMC coupled processes in single fractures and fractured rocks*, DECOVALEX-2011 Project Progress Report, Stage2 (in preparation)