



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta mechatroniky, informatiky
a mezioborových studií ■

Modelování transportních procesů v horninovém prostředí

Disertační práce

Studijní program: P3901 – Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor: 3901V055 – Aplikované vědy v inženýrství

Autor práce: **Ing. Jakub Říha**
Školitel: doc. Ing. Jiřina Královcová, Ph.D.





TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta mechatroniky, informatiky
a mezioborových studií ■

Modelling of Transport Processes in Rock Environment

Dissertation

Study programme: P3901 – Applied Sciences Engineering
Study branch: 3901V055 – Applied Sciences Engineering

Author: **Ing. Jakub Říha**
Supervisor: doc. Ing. Jiřina Královcová, Ph.D.



Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou disertační práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé disertační práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li disertační práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Disertační práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím mé disertační práce a konzultantem.

Současně čestně prohlašuji, že tištěná verze práce se shoduje s elektronickou verzí, vloženou do IS STAG.

Datum:

Podpis:

Abstrakt

Cílem této práce je prostředky matematického modelování přispět ke zlepšení pochopení a popisu transportních procesů v geosféře se zaměřením na dílčí aspekty hodnocení bezpečnosti hlubinného ukládání vyhořelého jaderného paliva.

Podstatnou částí bezpečnostního hodnocení je stanovení a popis transportní cesty, kterou se radionuklidy uvolněné z úložných obalových souborů mohou dostávat na hranici biosféry. V této práci jsou ukázána úskalí standardně používané metody particle tracking pro modely založené na konceptu kombinujícím ekvivalentní porézní médium a diskrétní puklinovou síť a následně navrženy dvě alternativní metody pro stanovení transportní cesty, jedna založená na opakovaných simulacích transportu s krátkým časovým krokem a jedna založená na vyhodnocení funkcionálu rychlosti a koncentrace pro jednotlivé elementy výpočetní sítě. Validita obou metod je demonstrována na třech testovacích úlohách spolu s popisem jejich výhod i nevýhod. Proces stanovení a popisu transportní cesty je následně ukázán na modelu reálné lokality, kde je využit jednak particle tracking a jednak jedna z navržených metod, srovnány jejich výsledky a podtržena větší škála využitelnosti metody v této práci navržené.

Chápeme-li transportní cestu jako jakýsi „kanál“ pro dominantní šíření radionuklidů především procesem advekce, pak difúze do matrice je proces klíčový pro jejich retenci. Tato práce se proto zabývá rovněž simulacemi dvou in-situ difúzních experimentů s cílem přispět k přesnějšímu popisu difúze v komplexních modelech transportních procesů v geosféře. Ze simulací difúzních experimentů jsou vyvozeny závěry obecnějšího charakteru využitelné pro modely reálných lokalit a navazující hodnocení bezpečnosti.

Klíčová slova:

Matematické modelování, rozpukané porézní médium, transportní cesta, particle tracking, difúze, in-situ experimenty, hodnocení bezpečnosti

Abstract

The aim of this dissertation thesis is, through the means of mathematical modelling, to contribute to an improvement of understanding and description of transport processes in the geosphere with the focus on particular aspects of safety assessment of deep repository of spent nuclear fuel.

An important part of the safety assessment is a determination and description of a transport path through which radionuclides released from waste disposal packages may migrate towards a biosphere boundary. In this thesis the drawbacks of commonly used particle tracking method are shown for models based on the concept combining equivalent porous medium and discrete fracture network and, subsequently, two alternative methods for determination of transport path are proposed; first one based on repeated transport simulations with small time step and the second one based on an evaluation of functional of velocity and concentration on individual computational mesh elements. Validity of both methods is demonstrated on three test cases along with the description of both their advantages and disadvantages. A process of transport path determination and description is then shown on the model of an actual site using the particle tracking method and one of its proposed alternatives. Results of both methods are cross compared and the greater range of usability of the proposed method is stressed out.

Assuming we perceive a transport path as a “channel” for dominant propagation of radionuclides mainly by the process of advection then the diffusion is a key process for their retention. Hence, this thesis also deals with simulation of two in-situ diffusion experiments with the aim to contribute to a more exact description of the diffusion process in complex transport models in a geosphere. From the diffusion experiments simulations some general conclusions are drawn which might be useful for modelling of actual sites and subsequent safety assessment.

Keywords:

Mathematical modelling, fractured porous media, transport path, particle tracking, in-situ experiments, safety assessment

Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval své školitelce doc. Ing. Jiřině Královcové, Ph.D. za podnětné odborné rady a konzultace v průběhu studia a při zpracování disertační práce.

Dále děkuji Správě úložišť radioaktivních odpadů, která výzkum z části financovala v rámci projektu Výzkumná podpora pro bezpečnostní hodnocení hlubinného úložiště a zároveň umožnila přístup k datům zejména ze zahraničních in-situ difúzních experimentů.

Práce byla podpořena také Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektu SGS č. 21066/115 na Technické univerzitě v Liberci.

V neposlední řadě patří mé poděkování rodině a přátelům za podporu a trpělivost.

Obsah

Seznam obrázků	9
Seznam tabulek	12
Seznam použitých zkratk	12
Úvod	13
1 Cíle práce a současný stav poznání	14
2 Konceptualizace modelu a matematicko-fyzikální popis	16
3 Modely difúzních experimentů	22
3.1 REPRO WPDE experiment	22
3.1.1 Slepá predikce, citlivostní analýza	23
3.1.1.1 Geometrie modelu a výpočetní síť	24
3.1.1.2 Model proudění	25
3.1.1.3 Model transportu	26
3.1.1.4 Výsledky simulací	28
3.1.1.5 Citlivostní analýza	31
3.1.2 Fitování modelu na měřená data, doplňující analýzy	36
3.1.3 Závěry pro simulaci transportních procesů v geosféře	42
3.2 LTDE-SD experiment	43
3.2.1 LTDE-SD simulace	45
3.2.1.1 Etapa_1	46
3.2.1.2 Etapa_2	53
3.2.2 Závěry pro simulaci transportních procesů v geosféře	56
4 Generování transportních cest v úloze transportu rozpukaným porézním médiem	58
4.1 Transportní cesty a metoda particle tracking	58
4.2 Alternativní metody hledání transportní cesty	60
4.2.1 Dynamický přístup	60
4.2.2 Statický přístup	62
4.3 Parametry transportní cesty	66
4.4 Testovací úlohy	68
4.4.1 První testovací úloha	68
4.4.2 Druhá testovací úloha	72
4.4.2.1 Dynamický přístup a vliv parametru τ	73

4.4.2.2	Statický přístup a vliv parametru p	75
4.4.2.3	Zhodnocení.....	78
4.4.3	Třetí testovací úloha.....	79
5	Transportní hodnocení modelu reálné lokality.....	85
5.1	Model lokality Kraví hora a jeho zhodnocení metodou particle tracking.....	85
5.2	Statická přístup pro zjištění transportní cesty, srovnání s výsledky particle tracking	90
5.3	Statický přístup – zpětný chod	91
	Závěr.....	94
	Reference	97
	Soubor prací autora	102
	Příloha A.....	104

Seznam obrázků

Obr. 1 Schéma konfigurace experimentu WPDE (převzato z Lofgren at al., 2015).....	23
Obr. 2 Geometrie modelu WPDE pro slepou predikci. Červená část představuje žilkovanou rulu (VGN), zelená část pegmatitovou žulu (PGR).....	24
Obr. 3 Výpočetní síť WPDE pro slepou predikci (část PGR skryta, aby byly vidět diskretizace pukliny).	24
Obr. 4 Výpočetní síť WPDE pro slepou predikci – řez. Dvě tenké vrstvy elementů matrice kolem pukliny.	25
Obr. 5 WPDE-1 – výsledek simulace proudění, pole darcyovského toku.....	26
Obr. 6 WPDE_1 – slepá predikce – výsledky (lineární časová škála)	29
Obr. 7 WPDE_1 – slepá predikce – výsledky (logaritmická časová škála)	30
Obr. 8 WPDE_2 – slepá predikce – výsledky (lineární časová škála)	30
Obr. 9 WPDE_2 – slepá predikce – výsledky (logaritmická časová škála)	31
Obr. 10 WPDE-2 – slepá predikce – citlivostní analýza – HTO.....	34
Obr. 11 WPDE-2 – slepá predikce – citlivostní analýza – Na-22.....	34
Obr. 12 WPDE-2 – slepá predikce – citlivostní analýza – Cl-36	35
Obr. 13 WPDE-2 – slepá predikce – citlivostní analýza – Sr-85	35
Obr. 14 WPDE-2 – slepá predikce – citlivostní analýza – Ba-133	36
Obr. 15 WPDE-2 – doplňující simulace, měřená data – HTO.....	38
Obr. 16 WPDE-2 – doplňující simulace, měřená data – Sr-85	40
Obr. 17 WPDE – sekvenční simulace obou experimentů – výsledky – HTO.....	41
Obr. 18 WPDE-2 – Ba-133 – vliv diskretizace, srovnání s měřenými daty a výsledky modelu GoldSim.....	42
Obr. 19 Schéma konfigurace experimentu LTDE-SD (převzato z Lofgren at al., 2015b)	44
Obr. 20 LTDE-SD – rozměry a umístění experimentálních sekcí.....	44
Obr. 21 Výsledky in-situ difúzního experimentu LTDE-SD – koncentrační profily pro Na-22 a Cl-36 – měřená data vs. Model. Převzato z (Nilsson et al. 2010, Obrázky 4-1a a 4-2a).	45
Obr. 22 LTDE-SD – závislost hodnoty porozity na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu). 47	
Obr. 23 LTDE-SD – závislost hodnoty distribučního koeficientu lineární sorpce na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu)	48
Obr. 24 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Na-22	50
Obr. 25 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Cl-36.....	51
Obr. 26 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Co-57	51
Obr. 27 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ni-63	52

Obr. 28 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ba-133.....	52
Obr. 29 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Cs-137.....	53
Obr. 30 LTDE-SD – model roztoku – Cs-137.....	55
Obr. 31 LTDE-SD – model roztoku – Ni-63.....	56
Obr. 32 LTDE-SD – Etapa_2 – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ni-63	56
Obr. 33 Dynamický přístup hledání transportní cesty - algoritmus	62
Obr. 34 Statický přístup hledání transportní cesty – východiska algoritmu.....	64
Obr. 35 Statický přístup hledání transportní cesty – jádro algoritmu	65
Obr. 36 Statický přístup hledání transportní cesty – jádro algoritmu – verze 2	65
Obr. 37 Úloha pro testování výpočtu délky transportní cesty a doby zdržení (p je tlaková výška).....	67
Obr. 38 Transportní cesta pro krok diskretizace 0,1 m	67
Obr. 39 Transportní cesta pro krok diskretizace 0,01 m	67
Obr. 40 Transportní cesta pro krok diskretizace 0,001 m – přibližný výřez	68
Obr. 41 První testovací úloha – geometrie	69
Obr. 42 První testovací úloha – výsledky particle tracking (jako podklad použity absolutní hodnoty darcyovské rychlosti [m/s])	70
Obr. 43 První testovací úloha – výsledky dynamického přístupu generování transportní cesty ($\tau = 100$ s).....	70
Obr. 44 První testovací úloha – výsledky statického přístupu generování transportní cesty ($\omega_v = 1$; $\omega_c = 2$; $p = 0,9$)	71
Obr. 45 Druhá testovací úloha – geometrie	73
Obr. 46 Druhá testovací úloha – výsledky particle tracking.....	73
Obr. 47 Druhá testovací úloha – dynamický přístup, $\tau = 100$ s	74
Obr. 48 Druhá testovací úloha – dynamický přístup, $\tau = 1000$ s	74
Obr. 49 Druhá testovací úloha – statický přístup - $\omega_c = 1$, $\omega_v = 0$ a $p = 0,9$ (vlevo); $\omega_c = 1$, $\omega_v = 0,01$ a $p = 0,9$ (vpravo).....	76
Obr. 50 Druhá testovací úloha – statický přístup ($\omega_c = 0$ a $\omega_v = 1$; $p = 0,9$).....	76
Obr. 51 Druhá testovací úloha – hmotnostní tok přes hranici; zdroj jako počáteční podmínka koncentrace	77
Obr. 52 Druhá testovací úloha – rozložení koncentrací v čase 45 000 s (vlevo) a 100 000 s (vpravo); konstantní zdroj koncentrace	77
Obr. 53 Druhá testovací úloha – vliv parametru napřímení (vlevo $p = 1,0$; vpravo $p = 0,9$)	78
Obr. 54 Třetí testovací úloha – geometrie.....	80
Obr. 55 Třetí testovací úloha – výsledek metody particle tracking.....	80
Obr. 56 Třetí testovací úloha – výsledek metody particle tracking - detail.....	80
Obr. 57 Třetí testovací úloha – dynamický přístup, $\tau = 10$ dní	81

Obr. 58 Třetí testovací úloha – statický přístup ($\omega_c = 0$ a $\omega_v = 1$; $p = 0,99$)	81
Obr. 59 Třetí testovací úloha – statický přístup ($\omega_c = 1$ a $\omega_v = 0$; $p = 0,99$)	82
Obr. 60 Třetí testovací úloha – statický přístup ($\omega_c = 1$ a $\omega_v = 0$; $p = 0,99$) – závislost průběhu transportní cesty na čase výstupu pole koncentrací (A = 6342 let, B = 15855 let, C = 31710 let, D = 47565 let, E = 158550 let)	82
Obr. 61 Třetí testovací úloha – hmotnostní tok přes hranici; konstantní zdroj koncentrace	83
Obr. 62 Třetí testovací úloha – hmotnostní tok přes hranici; zdroj jako počáteční podmínka koncentrace	83
Obr. 63 Kraví hora – rozsah modelu, říční síť a situace homogenních bloků	87
Obr. 64 Kraví hora – particle tracking – vyústění cest a klasifikace zdrojových bodů dle povodí drenáže	88
Obr. 65 Kraví hora – particle tracking – délka transportních cest	88
Obr. 66 Kraví hora – particle tracking – doba zdržení	89
Obr. 67 Kraví hora – význačné body – místo maximální koncentrace při povrchu a vyústění nejrychlejší cesty (particle tracking a statický přístup)	89
Obr. 68 Srovnání průběhu cest – particle tracking a statický přístup – osa X	90
Obr. 69 Srovnání průběhu cest – particle tracking a statický přístup – osa Y	91
Obr. 70 Srovnání průběhu cest – particle tracking a statický přístup – osa Z	91
Obr. 71 Statický přístup – zpětný chod – průběh cesty a vývoj koncentrace podél ní (v jednotkách hmotnosti na metr krychlový)	92
Obr. 72 Statický přístup – zpětný chod – vývoj hloubky a koncentrace podél cesty	93

Seznam tabulek

Tab. 1 WPDE – parametry modelu proudění.....	25
Tab. 2 WPDE – časové konstanty modelu transportu	27
Tab. 3 WPDE – slepá predikce - porozity	27
Tab. 4 WPDE – slepá predikce – parametry molekulární difúze (*Vanýsek, 2009).....	28
Tab. 5 WPDE – slepá predikce – parametry lineární sorpce.....	28
Tab. 6 WPDE-2 – citlivostní analýza – rozsahy parametrů	32
Tab. 7 WPDE-2 – citlivostní analýza – kvantitativní vyhodnocení	33
Tab. 8 Vliv změny porozity na efektivní difuzivitu	39
Tab. 9 WPDE-2 – rozdělení horninové matrice do vrstev.....	39
Tab. 10 LTDE-SD – závislost hodnoty porozity na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu). 47	
Tab. 11 LTDE-SD – hodnoty difuzivity ve volné vodě pro jednotlivé stopovače	48
Tab. 12 LTDE-SD – srovnání maximální hodnoty zjevné difuzivity s difuzivitou ve volné vodě	50
Tab. 13 Závislost relativní chyby délky transportní cesty na diskretizaci	68
Tab. 14 První testovací úloha – kvantitativní srovnání transportních cest	72
Tab. 15 Druhá testovací úloha – kvantitativní srovnání transportních cest.....	78
Tab. 16 Třetí testovací úloha – parametry modelu	80
Tab. 17 Třetí testovací úloha – kvantitativní srovnání transportních cest	83
Tab. 18 Srovnání cest – délka a doba zdržení.....	91

Seznam použitých zkratk

BDZ	Borehole Disturbed/Damaged Zone – zóna narušená/poškozená vrtáním
DFN	Discrete Fracture Network – diskrétní síť puklin
EDZ	Excavation Disturbed/Damaged Zone – zóna narušená/poškozená těžbou
EPM	Ekvivalentní Porézní Médium
GWFTS	Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes
HÚ	Hlubinné Úložiště
LTDE-SD	Long Term Sorption Diffusion Experiment
REPRO	Rock matrix REtention PROperties
REV	Representative Elementary Volume – reprezentativní elementární objem
SKB	Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Company
SÚRAO	Správa Úložišť Radioaktivních Odpadů
WPDE	Water Phase Diffusion Experiment

Úvod

Matematika je často nazývána jazykem vesmíru. S její pomocí můžeme popsat a předvídat chování věcí kolem nás. Užití matematiky k popsání nějakého systému se nazývá matematické modelování. S rozvojem levných a dostupných počítačů v posledních desetiletích proniklo matematické modelování do většiny technických věd. Může hrát významnou roli také v různých fázích návrhu a hodnocení bezpečnosti hlubinného úložiště (HÚ) vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů.

Na Ústavu nových technologií a aplikované informatiky Fakulty mechatroniky, informatiky a mezioborových studií Technické univerzity v Liberci je vyvíjen program Flow123D, který umožňuje řešení úlohy proudění podzemní vody v heterogenním horninovém prostředí a transportu látek v ní rozpuštěných. Užitím tohoto programu lze simulovat transportní procesy v rozpukaném porézním médiu (geosféře) a přispět tak ke zlepšení jejich pochopení a popisu se zaměřením na dílčí aspekty hodnocení bezpečnosti hlubinného ukládání vyhořelého jaderného paliva.

V kontextu hodnocení bezpečnosti HÚ se práce zaměřuje na dva jeho dílčí aspekty. V první řadě jsou to metody pro nalezení a popis transportní cesty, kterou se radionuklidy uvolněné z obalových úložných souborů mohou dostávat na hranici biosféry. V kapitole 4 je představena standardně užívaná metoda pro stanovení transportní cesty spolu se svými úskalími a následně navrženy dvě alternativní metody, jedna založená na opakovaných simulacích transportu s krátkým časovým krokem a jedna založená na vyhodnocení funkcionálu rychlosti a koncentrace pro jednotlivé elementy výpočetní sítě. Validita obou metod je demonstrována na třech testovacích úlohách spolu s popisem jejich výhod i nevýhod.

Proces stanovení a popisu transportní cesty je následně (v kapitole 5) ukázán na modelu reálné lokality, kde je využito jednak particle tracking a jednak jedna z navržených metod, srovnány jejich výsledky a podtržena větší škála využitelnosti metody v této práci navržené.

V práci je dále zkoumán proces difúze, konkrétně simulovány in-situ difúzní experimenty. V kapitole 3 jsou představeny dva zahraniční experimenty, data z nichž nám byla zpřístupněna díky SÚRAO podporované účasti v mezinárodní skupině řešitelů GWFTS. Cílem provedených a v kapitole 3 popsaných simulací je přispět k přesnějšímu popisu difúze v komplexních modelech transportních procesů v geosféře. Dále jsou z nich vyvozeny závěry obecnějšího charakteru využitelné pro modely reálných lokalit a navazující hodnocení bezpečnosti HÚ.

1 Cíle práce a současný stav poznání

Cílem této práce je prostředky matematického modelování přispět ke zlepšení pochopení a popisu transportních procesů v geosféře se zaměřením na dílčí aspekty hodnocení bezpečnosti hlubinného ukládání vyhořelého jaderného paliva.

Práce se zaměří na dvě témata: problematiku nalezení a popisu v nějakém smyslu dominantní transportní cesty a problematiku popisu difúze do horninové matrice.

Podstatnou částí bezpečnostního hodnocení je stanovení a popis transportní cesty, kterou se radionuklidy uvolněné z úložných obalových souborů mohou dostávat na hranici biosféry. Nejdále se svými výzkumy v této oblasti postoupili výzkumné týmy působící v zemích, v nichž je i proces návrhu a budování hlubinného úložiště nejdále, ve Švédsku a ve Finsku. V obou těchto zemích jsou proudění i transport převážně simulovány pomocí DFN modelů (viz níže). Jejich popis včetně metod stanovení transportní cesty a jejího využití při komplexním hodnocení bezpečnosti jsou popsány například v Poteri et al., 2014; SKB, 2015 (další reference viz rešeršní zpráva zahraničních přístupů k modelování HÚ, Uhlík et al., 2015).

V České republice je program hlubinného ukládání v o poznání ranější fázi, toho času ve fázi výběru nejvhodnější lokality. S tím je spojen mimo jiné také omezený soubor vstupních dat dostupných pro numerické simulace, jelikož provádět detailní průzkumné práce na všech devíti lokalitách, které jsou momentálně považovány za kandidátní, by bylo ekonomicky i technicky nerealizovatelné. V důsledku toho je pro simulaci proudění i transportu volen jiný koncept modelu, konkrétně ekvivalentní porézní médium (viz níže), případně jeho kombinace s diskretní sítí zlomů. Dalším podstatným rozdílem je výrazně jiná orografie tuzemských kandidátních lokalit ve srovnání s téměř dokonale plochými lokalitami skandinávskými (Anttila et al., 1999). V důsledku těchto rozdílů nelze jednoduše přebírat prostředky a kopírovat postupy dokumentované ve švédských a finských zprávách, jakkoli jsou cenným zdrojem zkušeností a experimentálních dat.

Běžně používanou metodou pro stanovení transportní cesty v modelech založených na konceptu ekvivalentního porézního média je particle tracking (např. Jackson, 2002). Popis různých implementací této metody je k nalezení v dostupné literatuře (Ahrens et al., 2005; Ayachit a Utkarsh, 2015; Clement, 1997; Konikow et al., 1996; Pollock, 2016; Zheng et al., 2012). Jakmile ale budeme chtít tuto metodu aplikovat na model s výpočetní sítí kombinující elementy různé dimenze (kombinace EPM a DFN), zjistíme, že narazíme na potíže plynoucí z nutnosti interpolovat v nespojitém rychlostním poli (obširnější popis viz kapitola 4), popsané například ve Willmann et al. (2013). V této práci jsou proto navrženy a otestovány dvě alternativní metody pro stanovení transportní cesty. V kapitole 4 jsou obě alternativní metody představeny a otestovány

na třech syntetických úlohách. V kapitole 5 je pak jedna z nich spolu s metodou particle tracking použita pro hodnocení transportu na reálné lokalitě.

Chápeme-li transportní cestu jako jakýsi „kanál“ pro šíření radionuklidů především advekcí, pak difúze do matrice je proces klíčový pro jejich retenci (Neretniecks, 1980; Glueckauf, 1980; Grisak a Pickens, 1980). Studií zabývajících se difúzí do matrice existuje celá řada, namátkou uveďme například Bibby, 1981; Carrera et al., 1998; Grisak a Pickens, 1981; Guimerà a Carrera, 2000; Haggerty et al., 2000; Maloszewski a Zuber, 1990; Neretnieks, 2002; Ota et al., 2003; Polak et al., 2003; Shapiro, 2001; Skagius a Neretnieks, 1986; Wood et al., 1990. Simulace difúze s využitím různých modelů a jejich implementací je běžný nástroj pro interpretaci laboratorních a in-situ experimentů (např. Savage et al., 2011; Soler et al., 2006, 2008, 2014, 2015; Wersin et al., 2006, 2010).

Právě interpretace experimentů je přetrvávající výzvou a stále aktuálním tématem (Lofgren et al., 2015b; Nilsson et al., 2010; Soler et al., 2015). To je doloženo mimo jiné i tím, že právě proces difúze (společně se sorpcí) je tématem aktuálně řešeným v mezinárodní skupině Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes (GWFTS) řízené SKB. Projekty Task Force jsou zaměřeny na spolupráci odborníků na numerické modelování v různých oblastech relevantních pro hlubinné úložiště. V této práci, v kapitole 3, jsou popsány modely dvou in-situ difúzních experimentů interpretující změřené průnikové křivky respektive koncentrační profily.

Obě v této práci zkoumaná témata jsou jen dílky skládky představující komplexní rozbor procesů podstatných pro bezpečností hodnocení projektu hlubinného úložiště. Úzce spolu nicméně souvisí, neboť transportní cesta je při výše zmíněném hodnocení považována za kanál spojující rozhraní mezi inženýrskými bariérami a geosférou s rozhraním mezi geosférou a biosférou. Difúze je pak proces, který významně přispívá k retardaci (obzvláště sorbujících) radionuklidů během jejich transportu touto cestou.

2 Konceptualizace modelu a matematicko-fyzikální popis

Zaměřením této práce je výzkum metod hodnocení transportních procesů v prostředí tvrdých hornin. Ty jsou charakteristické tím, že podzemní voda v nich se vyskytuje prakticky výhradně v puklinách, zlomech a zvětralé části horniny. Cílem tohoto hodnocení je stanovit, jak dobře dané prostředí umožňuje nebo zabraňuje migraci respektive retenci látek. Studované metody pak mají posloužit především pro komparativní hodnocení lokalit vytípaných pro hlubinné ukládání vyhořelého jaderného paliva.

Vyděme z reálné reprezentace horninového prostředí, tedy kontinua existujícího v časoprostoru. Na tomto kontinuu chceme popsat procesy proudění podzemní vody a transportu látek v ní rozpuštěných. K tomu je třeba definovat jejich matematicko-fyzikální popis, obvykle ve formě (parciálně) diferenciálních rovnic. Matematicko-fyzikální popis bude uveden v samostatné kapitole práce. Doplníme-li tyto rovnice o počáteční a okrajové podmínky, je v některých jednoduchých případech možné řešit je analyticky a popsat tak průběh neznámých spojitě v prostoru (pro nestacionární jevy také v čase). U složitějších úloh toto možné není, je tak třeba řešit je numericky. To v praxi znamená, že spojitá oblast je některou z dobře známých metod (metoda konečných prvků, metoda konečných diferencí, ...) převedena na diskrétní; diferenciální rovnice na soustavu rovnic algebraických. Vyřešením této soustavy ať už metodou přímou, kdy v konečném počtu kroků dostaneme přesné řešení (v aritmetice s nekonečnou přesností), nebo iterační, kdy v konečném počtu kroků dostaneme řešení přibližné (přesto jsou tyto metody typicky výhodnější, především díky své rychlosti ale také díky nižší paměťové náročnosti), dostaneme hodnoty neznámých ve vybraných bodech časoprostoru (uzlech diskretizace). Celý tento proces zanáší do řešení úlohy celou řadu chyb (chyba popisu, chyba numerické metody, zaokrouhlovací chyby, ...), jež je třeba vést v patrnosti, ale jejichž analýza není předmětem této práce.

Volba matematicko-fyzikálního popisu a metod diskretizace a řešení soustavy rovnic společně konstituují matematický model.

Je třeba určit konkrétní kvantitativní ukazatele, které hodnocení transportních procesů umožní. Mějme výpočetní oblast Ω s hranicí $\delta\Omega$. Buď Ω_i podoblastí oblasti Ω . Na Ω_i je předepsáno počáteční rozložení koncentrace c_j [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$] transportované látky j , její zdroj (ne nutně konstantní v čase) Qc_j [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$] nebo kombinace obého. Naším cílem je popsat, kudy, za jak dlouho a v jakém množství se látka j dostane z oblasti Ω_i na hranici $\delta\Omega$. To obnáší stanovení následujícího:

- Průběh transportní cesty – v nějakém smyslu významná posloupnost bodů nebo elementů diskretizace oblasti Ω spojující Ω_i a $\delta\Omega$.
- Délka této transportní cesty [m].

- Doba zdržení [s] – jak dlouho trvá postup hypotetické částice látky j stanovenou transportní cestou.
- Míra ředění [-] – podíl koncentrací nebo hustot toku na konci a na počátku transportní cesty.

Vstupem pro stanovení výše uvedeného je model (jeho parametry a diskretizace výpočetní oblasti) a jeho výstupy (rychlosti, tlaky, koncentrace, ...). V tomto modelu je zahrnuto proudění podzemní vody a některé (nebo všechny) z těchto transportních procesů: advekce, hydrodynamická disperze, molekulární difuze, sorpce, radioaktivní rozpad. Je třeba si uvědomit, že při hodnocení transportu je na jeho jednotlivé procesy možno nahlížet jako na ve výsledku hnací (typicky advekce) nebo retardační (např. sorpce). Molekulární difuze může v modelu fungovat v obou těchto smyslech v závislosti na jeho konceptu (možné konceptualizace modelu budou uvedeny dále v textu) a pochopitelně také na konkrétní řešené úloze. To, jaké procesy jsou v transportním modelu zahrnuty, ovlivní přístup ke stanovení průběhu transportní cesty a k jejímu kvantitativnímu popisu.

Prostředí tvrdých krystalinických hornin (např. granit, kvarcit, čedič, atp.) má malou mezizrnou porozitu, jsou to tak pukliny a trhliny, jež představují zóny vyšší permeability a tedy také rychlejšího pohybu podzemní vody. Takové rozpukané horninové médium lze chápat jako bloky horniny vzájemně oddělené diskretními puklinami. Ty mohou být otevřené nebo vyplněné nějakým minerálem. Otevřené pukliny představují kanály pro rychlý pohyb podzemní vody a transport látek v ní rozpuštěných v jinak relativně nepropustné horninové matici. V malém měřítku je rozpukané horninové médium silně heterogenní. Mezi hlavní faktory ovlivňující tok vody takovým médiem patří směr puklin, jejich hustota, efektivní rozevření a charakter horninové matrice. Pukliny paralelní s hydraulickým spádem budou daleko efektivnější transportní cestou než ty, co jsou k němu kolmé.

Existuje několik způsobů, jak rozpukané médium v modelu reprezentovat (konceptualizovat). Uvedme si tři nejrozšířenější:

- Ekvivalentní porézní médium (EPM) – horninový systém s vysokou hustotou vzájemně propojených puklin různých směrů může být v regionálním měřítku považován za statisticky spojitě porézní médium s ekvivalentními nebo efektivními hydraulickými vlastnostmi. Tento přístup předpokládá možnost definovat reprezentativní elementární objem (REV) materiálu charakterizovaný efektivními hydraulickými parametry (hydraulická vodivost, porozita, storativita). Přístup je rozumně použitelný pro simulaci chování regionálního systému proudění, pro lokální modely se příliš nehodí.
- Diskretní puklinová síť (DFN) – tento přístup zcela zanedbává mezizrnou porozitu jako médium pro proudění podzemní vody, které se tak omezuje, jak již název napovídá, na diskretní puklinovou síť. To neznamená, že horninová

matrice je modelem zcela opomíjena, uplatní se při simulaci transportu jako retenční médium, jehož porozita slouží pro šíření unášené látky difúzí a pro její vázání (a případně následné uvolňování) v matici mechanismem sorpce. Transportní výměna mezi sítí puklina horninovou maticí je přirozeně obousměrná, řízená směrem koncentračního gradientu. Úskalím tohoto přístupu je potřeba diskretní puklinovou síť popsat. Deterministicky pro každou jednotlivou puklinu je to mimo velmi malá měřítka úlohy prakticky nemožné, statistický popis pak vyžaduje homogenitu populace puklin (ve smyslu jejich velikosti a orientace) nebo rozšíření pojmu homogenity o statistický popis heterogenity (populace puklin). Pro úlohy v regionálním měřítku pak může být problémem výpočetní náročnost.

- Dvojitá porozita (kombinace EPM a DFN) – proudění je simulováno jak v diskretní puklinové síti, tak i v horninové matici. Koncept lze použít pro případy, kdy buď horninová matrice má nezanedbatelnou mezizrnou porozitu nebo diskretní puklinová síť reprezentuje jen nejvýznamnější pukliny či zlomy a zbylé, méně významné pukliny jsou součástí ekvivalentního porézního média horninové matrice (popis pomocí REV). Samozřejmostí je proudění vody mezi oběma typy porozity, tedy mezi EPM a DFN.

Vraťme se nyní k pojmu reprezentativní elementární objem. Podzemní prostor není spojitě vyplněný minerály (či zeminou), mezi částicemi pevné látky existují volná místa vyplněná kapalinou nebo plynem. Tato volná místa se nazývají póry. Protože přesný popis dějů v porézním prostředí by byl z důvodu mikroskopické struktury složitý, uvažujeme o porézním prostředí jako o kontinuu. Zavádíme pojem reprezentativního elementárního objemu, což je nejmenší možný objem, na kterém lze provést měření poskytující hodnoty odpovídající celku. S objemy menšími než REV nelze pracovat jako s kontinuem. Abychom určili vlastnosti porézního prostředí, musíme proměřit jeho vzorky. Jsou-li však vzorky příliš malé, výsledky měření mají sklon oscilovat. S tím, jak zvětšujeme velikost vzorku, se oscilace tlumí až do okamžiku, kdy je velikost vzorku dostatečná pro to, aby byly výsledky měření konzistentní. Právě taková velikost vzorku se označuje jako REV. Velikost vzorku však nelze zvětšovat do nekonečna, neboť při určité velikosti může začít zasahovat do jiných hydrostratigrafických vrstev (takové vrstvy mají odlišné chemické nebo fyzikální vlastnosti). Velikost vzorku, kdy toto nastane, se nazývá maximální elementární objem (MEV). Veličiny popisující porézní prostředí jsou pomocí REV definovány vztahem:

$$\alpha = \frac{1}{V} \int_V \alpha^{mic} dV \quad (1)$$

Ten průměruje mikroskopickou veličinu (koncentrace, tlak, ...) α^{mic} přes objem REV.

Nyní si uveďme základní vztahy, jimiž se řídí proudění podzemní vody a transport látek v ní rozpuštěných tak, jak jsou implementovány v modelu Flow123D, který byl využíván pro všechny níže popsané simulace.

Proudění podzemní vody (v saturovaném prostředí, na něž se omezíme) je popsáno Darcyho zákonem a rovnicí kontinuity (zákonem zachování hmotnosti).

Darcyho zákon je fenomenologicky odvozený vztah, který definuje rychlost průtoku kapaliny porézním prostředím:

$$\vec{u} = -\mathbf{K} \cdot \vec{\nabla} \Phi, \quad (2)$$

kde \vec{u} je filtrační (darcyovská) rychlost, \mathbf{K} je tenzor hydraulické vodivosti a Φ je piezometrická výška. Vedle filtrační rychlosti se zavádí ještě rychlost pórová (intersticiální). Ta se z rychlosti filtrační získá vydělením porozitou:

$$\vec{v} = \frac{\vec{u}}{n}. \quad (3)$$

Obě dvě výše zmíněné rychlosti se udávají v jednotkách délky na jednotku času [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$].

Piezometrická výška v sobě zahrnuje potenciál tíhového pole daný z-ovou souřadnicí a potenciál tlaku:

$$\Phi = p + z, \quad (4)$$

kde p je tlaková výška, která má význam tlaku vyjádřeného v délkových jednotkách:

$$p = \frac{\pi}{\rho \cdot g}, \quad (5)$$

kde π označuje dynamickou složku tlaku [Pa], ρ je hustota kapaliny [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$] a g je tíhové zrychlení [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$].

Lineární Darcyho zákon nelze použít vždy. Jeho platnost je omezena shora i zdola. Zdola je omezena existencí molekulárních sil, které, při nízkých gradientech tlaku, proudění zpomalují nebo dokonce zcela znemožňují. Shora je platnost Darcyho zákona omezena pouze na laminární proudění, pro turbulentní proudění ztrácí přesnost. Je-li proudění laminární nebo turbulentní, lze určit z Reynoldsova čísla, které se dá pro proudění v porézním prostředí vyjádřit jako:

$$Re = \frac{\rho \cdot u \cdot d_{30}}{\mu}, \quad (6)$$

kde d_{30} je charakteristický rozměr zrn a μ je dynamická viskozita kapaliny [$\text{Pa} \cdot \text{s}$]. Jedná se bezrozměrný parametr. Darcyho zákon lze použít pro hodnoty Reynoldsova čísla menší než deset.

Rovnice kontinuity vyjadřuje, že v libovolném objemu musí změna hmotnosti kapaliny odpovídat množství kapaliny prošlé přes hranici a změně hmotnosti vzešlé ze zdrojů respektive propadů. Hmota tedy nemůže vznikat ani zanikat, může se jen přesouvat z místa na místo. Rovnici kontinuity lze vyjádřit v integrálním tvaru:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho \cdot n) dV = - \int_{\partial V} (\rho \cdot \vec{u} \cdot \vec{n}) dS + \int_V (P \cdot \rho) dV, \quad (7)$$

kde P je hustota zdrojů či propadů vyjádřená jako objem kapaliny vtlačený do jednotkového objemu za jednotku času [$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$], n je porozita a \vec{n} je vektor jednotkové vnější normály. Užitím Gaussovy věty lze tuto rovnici převést do diferenciálního tvaru:

$$\frac{\partial(\rho \cdot n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \vec{u}) = P \cdot \rho. \quad (8)$$

Počítáme-li s prostředím bez zdrojů, kde navíc předpokládáme konstantní hustotu (nestlačitelná kapalina) a porozitu (nestlačitelné prostředí), dostaneme:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (9)$$

Transport látek ve vodě rozpuštěných je řízen advekcí a disperzí (difúzí). Je popsán soustavou (pro více transportovaných látek) rovnic pro zákon zachování hmoty:

$$\partial_t(\delta n c^i) + \text{div}(\vec{v} c^i) - \text{div}(n \delta \mathbf{D}^i \nabla c^i) = F_S^i + F_C^i + F_R(c^1, \dots, c^s). \quad (10)$$

Neznámou je koncentrace c^i [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$] látky $i \in \{1, \dots, s\}$. Ostatními kvantitami jsou:

Tenzor disperzivity \mathbf{D}^i [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$] vyjádřitelný jako:

$$\mathbf{D}^i = D_m^i \tau \mathbf{I} + |\vec{v}| \left(\alpha_T^i \mathbf{I} + (\alpha_L^i - \alpha_T^i) \frac{\vec{v} \otimes \vec{v}}{|\vec{v}|^2} \right), \quad (11)$$

který reprezentuje (izotropní) molekulární difúzi a mechanickou disperzi podélnou a příčnou ve vztahu ke směru proudění. D_m^i [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$] je molekulární difuzivita i -té látky, $\tau = n^{1/3}$ je tortuozita, α_L^i [m] a α_T^i [m] jsou podélná respektive příčná disperzivita.

δ_d [m^{3-d}] je koeficient průřezu (mocnost pukliny nebo průřez kanálu).

F_S^i [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-d} \cdot \text{s}^{-1}$] reprezentuje hustotu zdrojů koncentrace v porézním médiu.

F_C^i [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-d} \cdot \text{s}^{-1}$] je hustota zdrojů koncentrace představující látkovou výměnu mezi regiony o různé dimenzi.

$F_R(\dots)$ [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-d} \cdot \text{s}^{-1}$] je reakční člen (sorpc, radioaktivní rozpad, dvojitá porozita).

Flow123D umožňuje v rámci výše uvedeného dva přístupy k simulaci transportu:

- Pro simulaci čisté advekce ($\mathbf{D} = 0$) lze využít metodu štěpení operátoru, která představuje konečně-objemový řešič explicitní v čase. Řešení jednoho kroku je rychlejší, ale maximální časový krok je omezen (kvůli stabilitě). Výsledná koncentrace je po částech konstantní na elementech výpočetní sítě. Tento řešič zahrnuje reakční člen (včetně jednoduchých chemických reakcí a sorpce).
- Pro simulaci zahrnující rovněž difúzi lze využít nespojitou Galerkinovu metodu, implicitní v čase. Nemá žádnou restrikcii pro maximální délku časového kroku a prostorová aproximace je po částech polynomiální (až do řádu 3). Reakční člen je prozatím implementován jen pro lineární sorpci:

$$F_R^i = -\partial_t \left((1 - n) \delta M^i \rho_s c_s^i \right), \quad c_s^i = \frac{k_l^i}{\rho_l} c, \quad (12)$$

kde c_s^i [$\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$] je koncentrace sorbované látky, k_l^i [$\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$] je sorpční koeficient, ρ_s a ρ_l [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$] jsou hustoty pevné respektive kapalná fáze. M^i [$\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$] označuje molární hmotnost i -té látky. Počáteční koncentrace v pevné fázi je uvažována v rovnováze s fází kapalnou. Sorpční koeficient k_l [$\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$] použitý jako vstup modelu je z rovnovážného koeficientu lineární sorpce K_D [$\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}$] počítán jako:

$$k_l = K_D M^{-1} \rho_l. \quad (13)$$

Více informací o použitém simulačním software je spolu s popisem jím použitého matematicko-fyzikálního modelu lze nalézt v Březina a Hokr, 2011; Březina, 2012; Šístek et al., 2015 případně v dokumentaci dostupné online (<http://flow123d.github.io/>).

Obširnější vysvětlení pojmů použitých v této kapitole lze nalézt například v Singhal a Gupta, 2010.

3 Modely difúzních experimentů

Cílem této části disertační práce je přispět k přesnějšímu popisu difúze v komplexních modelech transportních procesů v geosféře (především v tvrdých krystalinických horninách). Za tímto účelem byla použita data ze dvou zahraničních in-situ difúzních experimentů (popsaných níže).

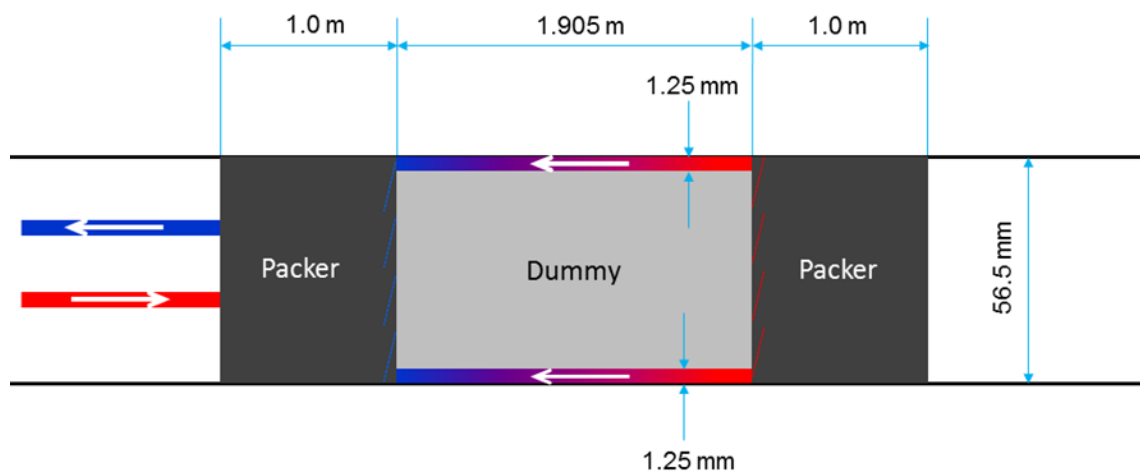
Modely difúzních experimentů popisované v této části práce byly vytvářeny v rámci projektu SÚRAO „Výzkumná podpora pro bezpečnostní hodnocení hlubinného úložiště“, konkrétně jeho části „Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů“. Cílem projektu je posunout modely difúze konzervativních i sorbujících stopovačů (radionuklidů) k většímu realismu. Přístup k experimentálním datům byl zajištěn účastí řešitelů v mezinárodní skupině Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes (GWFTS) řízené SKB. Projekty Task Force jsou zaměřeny na spolupráci odborníků na numerické modelování v různých oblastech relevantních pro hlubinné úložiště. Úlohy jsou orientovány na porovnání modelů mezi sebou i společnou interpretaci poskytnutých experimentálních dat. Práce v projektu pokrývá problematiku v širokém, až mezioborovém rozsahu. Pro vyhodnocení je třeba propojit fakta detailů chování radionuklidů v hornině přes porozumění různým koncepčním modelům transportu a jejich souvislostem, až po vlastnosti numerických algoritmů, které mohou ovlivnit výsledky (varianty metod, diskretizace, nelinearity). V modelování experimentálních dat je pak rozlišován různý kontext použití modelu – jako přímou úlohu můžeme označit výpočet s konkrétními danými vstupy, zatímco v inverzní úloze hledáme hodnoty parametrů (nebo vybíráme z více modelových popisů) s cílem dosažení shody výsledků s experimentem. V prvním případě pak má vedle verifikace (správnosti modelů ve smyslu přesnosti řešení rovnic) také specifický význam tzv. slepá predikce, kdy autor při řešení do prezentace výsledků nezná (experimentální) data, se kterými se mají výsledky porovnat. Koncepce projektu umožňuje i tzv. validaci, kdy jsou modely vzniklé inverzní analýzou jednoho experimentu ověřeny proti jinému experimentu ve srovnatelných podmínkách slepou predikcí.

Simulovány byly experimenty provedené jednak v rámci LTDE-SD (Long Term Sorption Diffusion Experiment) v Äspö Hard Rock Laboratory ve Švédsku a jednak v rámci projektu REPRO (Rock matrix RETention PROerties) v podzemní výzkumné laboratoři v Onkalo ve Finsku (provádí POSIVA).

3.1 REPRO WPDE experiment

WPDE (Water Phase Diffusion Experiment) je advekčně-difúzně-sorpční experiment prováděný v laboratoři REPRO přibližně 400 m pod zemí. Experiment je umístěný ve vrtu, kde přibližně 18 až 20 m od stěny rozrážky je mezi dvěma pakry umístěna 1,9 m dlouhá sekce s koaxiálně umístěnou ucpávkou o průměru 54 mm, což ve vrtu o průměru 56,5 mm ponechává 1,25 mm tlustou mezeru kolem jeho stěny (viz Obr. 1).

Tuto mezeru můžeme považovat za umělou puklinu s relativně dobře definovanou geometrií. V mezeře je během experimentu udržován velmi malý průtok. Byly provedeny dva experimenty s odlišnými hodnotami průtoku (20 $\mu\text{l}/\text{min}$ pro WPDE-1 a 10 $\mu\text{l}/\text{min}$ pro WPDE-2). Tok byl tvořen syntetickou podzemní vodou s rozpuštěnými stopovači (HTO, Na-22 a Cl-36 pro WPDE-1 a totéž plus Sr-85 a Ba-133 pro WPDE-2). Injektáž byla v obou případech realizována formou několik hodin trvajícího pulzu. Experimentální uspořádání je navrženo tak, aby pulz stopovače cestoval společně s tokem vody s tím, že stopovač se bude cestou difundovat do horninové matrice obklopující vrt, kde může zároveň sorbovat. Následně, poté co pulz projde, se koncentrační gradient obrátí a stopovače se difuzí budou vracet zpět do proudící vody. Na konci experimentální sekce jsou detekovány průnikové křivky (závislost koncentrace či aktivity na čase), které jsou rovněž výstupem numerických simulací.



Obr. 1 Schéma konfigurace experimentu WPDE (převzato z Lofgren at al., 2015)

Popis simulace těchto experimentů bude rozdělen do dvou částí. V první budou popsány simulace tak, jak probíhaly bez znalosti měřených dat (jako tzv. slepá predikce). V druhé bude popsán postup fitování modelu na měřená data, přesněji řečeno na ty jejich aspekty, které jsou modelem postižitelné. Obsah této druhé části byl vytvořen čistě pro účely této disertační práce, nad rámec toho, co bylo řešeno v mezinárodní skupině řešitelů.

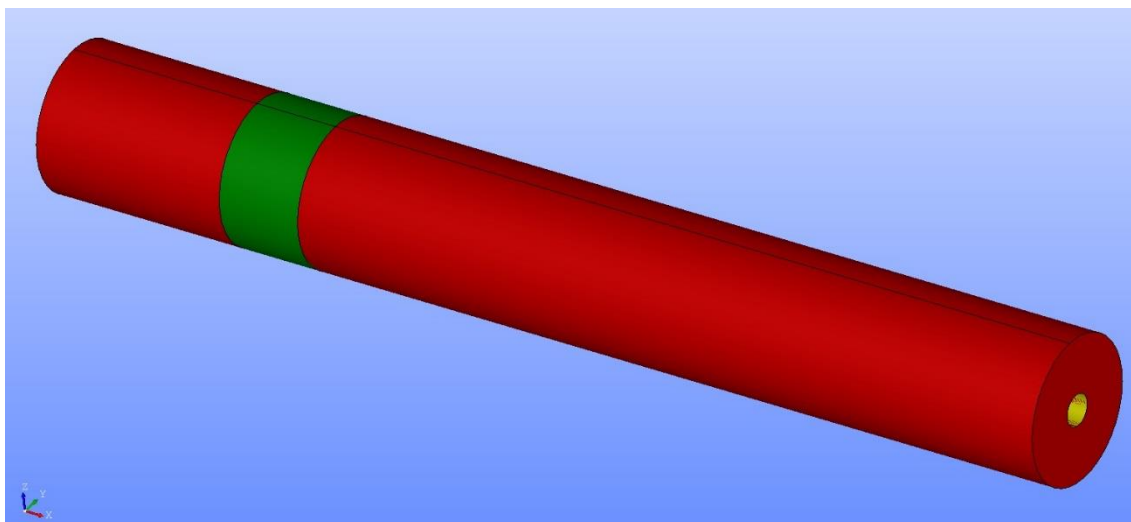
3.1.1 Slepá predikce, citlivostní analýza

Primárním úkolem zúčastněných modelářských týmů (v rámci GWFTS) byla u WPDE experimentů slepá predikce, kdy měly být modely verifikovány mezi sebou shodným zadáním vstupů (uspořádání experimentu, parametry modelu), které byly specifikovány v zadávací dokumentaci (Lofgren at al., 2015a). Přirozeně nebylo lze očekávat, že výstupy všech týmů budou shodné, jelikož různé modely využívají jiné koncepty, jiné numerické metody a různé diskretizace. Přesto bylo ambicí dosáhnout relativní shody mezi sebou dříve, než budou uvolněna měřená data (průnikové křivky).

Veškeré níže popsané simulace byly realizovány pomocí SW Flow123D ve verzi 1.8.3.

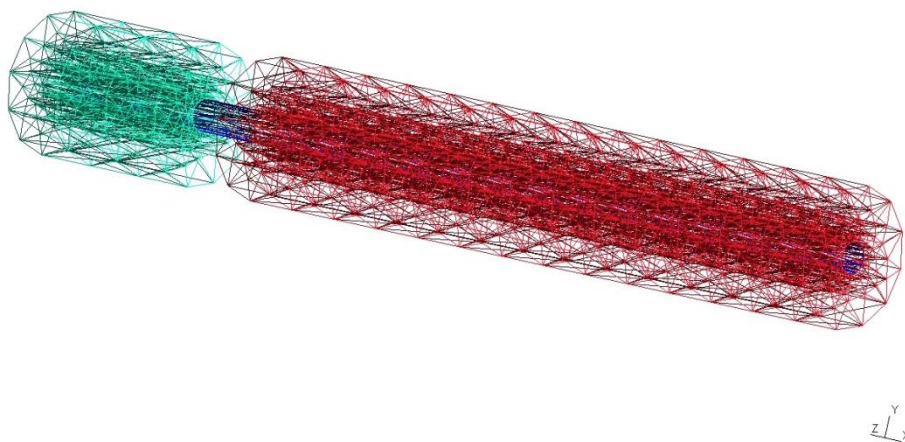
3.1.1.1 Geometrie modelu a výpočetní síť

Geometrie modelu je tvořena 2D umělou puklinou a 3D horninovou maticí (rozdělenou do tří částí). Geometrie je znázorněna na Obr. 2. Horninová matrice je rozdělena do tří objemů s cílem rozlišit jednotlivé horninové typy: VGN1 (0 – 0,35 m ve směru osy x), PGR (0,35 – 0,5 m) a VGN2 (0,5 – 1,905 m). Větší míra heterogenity horninové matrice nebyla dle zadávací dokumentace při slepé predikci přípustná. Rozevření pukliny je 1,25 mm, mocnost horninové matrice 0,1 m a poloměr ucpávky 28,25 mm.

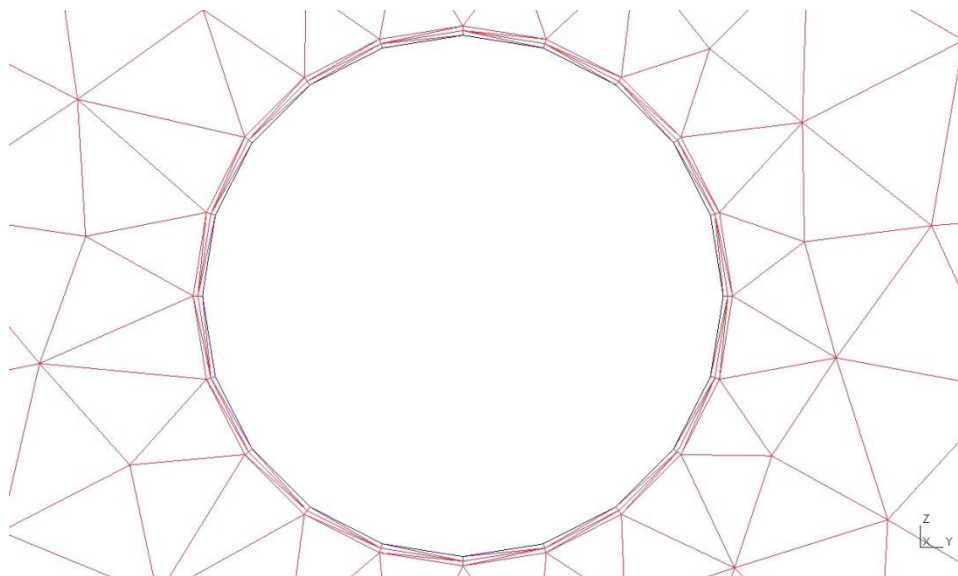


Obr. 2 Geometrie modelu WPDE pro slepou predikci. Červená část představuje žilkovanou rulu (VGN), zelená část pegmatitovou žulu (PGR).

Výpočetní síť modelu je znázorněna na Obr. 3 a Obr. 4. Skládá se z 720 2D elementů reprezentujících puklinu a 12 096 3D elementů reprezentujících horninovou matici. Puklinu obklopují dvě tenké vrstvy elementů matrice. Jejich přítomnost významně zpřesňuje výsledky modelu pro sorbující stopovače (viz dále).



Obr. 3 Výpočetní síť WPDE pro slepou predikci (část PGR skryta, aby byly vidět diskretizace pukliny).



Obr. 4 Výpočetní síť WPDE pro slepou predikci – řez. Dvě tenké vrstvy elementů matrice kolem pukliny.

3.1.1.2 Model proudění

Parametry modelu proudění byly spočteny (případně zvoleny) tak, aby výsledná rychlost proudění odpovídala průtokům v experimentu (20 $\mu\text{l}/\text{min}$ pro WPDE-1 a 10 $\mu\text{l}/\text{min}$ pro WPDE-2) a aby vyhověly popisu v zadávací dokumentaci (permeabilita horninové matrice v řádu $1\text{e-}19 \text{ m}^2$). Jsou uvedeny v Tab. 1.

Tab. 1 WPDE – parametry modelu proudění

	WPDE-1	WPDE-2
Hydraulická vodivost pukliny	1,28 m/s	1,28 m/s
Hydraulická vodivost matrice	9,81e-13 m/s	9,81e-13 m/s
OKP na výtokové části pukliny	Dirichlet $\Phi = 0 \text{ m}$	Dirichlet $\Phi = 0 \text{ m}$
OKP na vtokové části pukliny	Neumann $q = -1,536\text{e-}6 \text{ m/s}$	Neumann $q = -0,768\text{e-}6 \text{ m/s}$
OKP na zbylých hranicích	Homogenní Neumann ("no flow")	Homogenní Neumann ("no flow")
Vodní bilance	$3,35\text{e-}10 \text{ m}^3/\text{s} \sim 20 \mu\text{l}/\text{min}$	$1,68\text{e-}10 \text{ m}^3/\text{s} \sim 10 \mu\text{l}/\text{min}$

Hydraulická vodivost pukliny byla spočtena z jejího rozevření pomocí kubického zákona:

$$K = \frac{\rho \cdot g}{12\mu} \cdot b^2, \quad (14)$$

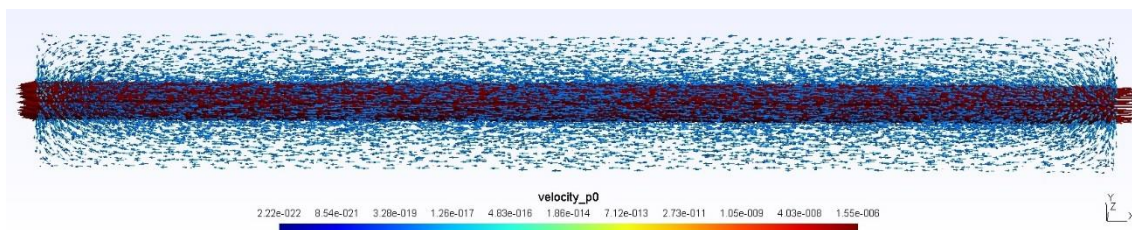
kde b je rozevření pukliny [m], ρ je hustota vody [kg/m^3], g je tíhové zrychlení [m/s^2] a μ je dynamická viskozita vody [$\text{N}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-2}$].

Hydraulická vodivost horninové matrice byla spočtena ze známé hodnoty permeability κ [m^2] jako:

$$K = \kappa \cdot \frac{\rho \cdot g}{\mu}. \quad (15)$$

Hodnota Neumannovy okrajové podmínky na vtokové části hranice byla spočtena jako podíl požadovaného toku puklinou a plochy jejího řezu (spočtené jako plocha mezikruží). V použité verzi SW Flow123D je tok uvažován vždy ve směru jednotkové vnější normály, proto je u hodnoty vtoku záporné znaménko.

Výsledek simulace proudění je znázorněn na Obr. 5 (pro experiment WPDE-1). Je zjevné, že i v horninové matrici je tok nenulový. Je ale o mnoho řádů menší než tok v puklině.



Obr. 5 WPDE-1 – výsledek simulace proudění, pole darcyovského toku.

3.1.1.3 Model transportu

Simulován byl transport tří (WPDE-1) respektive pěti (WPDE-2) stopovačů. V zadávací dokumentaci je u každého z experimentů pro každý ze stopovačů uvedena injektovaná aktivita [Bq]. Dále byl znám objem roztoku, ve kterém byly stopovače rozpuštěny (1 ml pro WPDE-1, 3 ml pro WPDE-2). Jelikož ve Flow123D je transportovanou kvantitou nikoli aktivita ale hmotnost, bylo nejprve třeba provést přepočítání aktivity na hmotnost [g] jejím vydělením specifickou aktivitou a [Bq/g]:

$$a = \frac{\ln(2) \cdot N_A}{T_{1/2} \cdot M}, \quad (16)$$

kde N_A je Avogadrova konstanta, $T_{1/2}$ je poločas rozpadu [s] (tabelovaný v zadávací dokumentaci) a M je molární hmotnost [g/mol].

Okrajové podmínky transportu byly předepsány na vtokové části pukliny tak, aby injektovaná množství odpovídala zadání.

Doba trvání injektáže byla spočtena ze známých kvantit (objem roztoku se stopovači a rychlost toku). Čas nula simulační periody je v okamžiku, kdy započalo vtláčení

stopovačů. Před vstupem do experimentální sekce (pukliny) musel roztok projít PEEK (PolyEtherEtherKeton) potrubím o známé délce a vnitřním průměru, ze kterých byla spočtena doba zpoždění. V modelu, který zahrnuje jen samotnou experimentální sekci, je tak okrajová podmínka sepnuta až v čase odpovídajícím tomuto zpoždění. K analogickému zpoždění dochází rovněž při výstupu z experimentální sekce, v tomto případě je o jeho hodnotu posunuta časová osa výstupů modelu (průnikové křivky), aby byly srovnatelné s experimentálně změřenými daty. Jelikož ani přírodní ani odvodní potrubí nejsou explicitně modelovány, je v simulaci zanedbána případná disperze v nich.

Po ukončení injektáže byla okrajová podmínka transportu přepnuta na Dirichletovu OKP nulové koncentrace.

Časové konstanty modelu transportu jsou uvedeny v Tab. 2.

Tab. 2 WPDE – časové konstanty modelu transportu

	WPDE-1	WPDE-2
Simulační perioda	8760 h (1 rok)	17520 h (2 roky)
Zpoždění OKP/výtoku	16 h / 17 h	32 h / 34 h
Trvání injektáže (OKP)	50 min	5 h

Hodnoty porozity použité při slepé predikci jsou uvedeny v Tab. 3, byly odvozeny dle zadávací dokumentace jako aritmetický průměr měření na vzorcích z vrtného jádra. Nižší podíl dostupné porozity pro chlor je dán uvažovanou aniontovou exkluzí.

Tab. 3 WPDE – slepá predikce - porozity

Porozita [-]	
Puklina	1
VGN	8,2e-3
PGR	5e-3
Cl-36 VGN	1,75e-4
Cl-36 PGR	1,3e-2

Jelikož je rychlost proudění podzemní vody v horninové matici zanedbatelná, je hydrodynamická disperze uvažována pouze v puklině. Koeficient podélné disperzivity je uvažován jako 10 % charakteristické délky ($\alpha_l = 0,19$ m), koeficient příčné disperzivity jako desetina té podélné ($\alpha_T = 0,019$ m). Jedná se o jediný parametr modelu, jehož hodnota nemá oporu v měřených datech, nejistota jeho zadání je tak velká.

V Tab. 4 jsou uvedeny parametry molekulární difúze použité pro slepou predikci. Jejich hodnoty byly částečně převzaty ze zadávací dokumentace, hodnoty v ní neuvedené

byly dohledány v rámci literární rešerše (zdroje uvedeny přímo u jednotlivých hodnot v Tab. 4).

Distribuční koeficienty lineární sorpce použité pro slepou predikci jsou uvedeny v Tab. 5. Jejich hodnoty byly převzaty ze zadávací dokumentace. V puklině není sorpce uvažována.

Hustota horniny byla uvažována 2700 kg/m^3 , hustota vody 1000 kg/m^3 .

Radioaktivní rozpad nebyl simulován (měřené průnikové křivky byly na tento předpoklad zadavatelem korigovány).

Tab. 4 WPDE – slepá predikce – parametry molekulární difúze (*Vanýsek, 2009)

	Efektivní difuzivita D_e [m^2/s]		Difuzivita ve volné vodě [m^2/s]
	VGN	PGR	Puklina
HTO	1,83e-13	5,7e-13	2,3e-9*
Cl-36	0,05e-13	5e-13	1,33e-9*
Na-22	4,65e-13 (Kaukonen et al., 1997)		2,03e-9*
Sr-85	3,3e-13 (Skagius et al., 1999)		7,91e-10*
Ba-133	1,47e-13 (Widestrand et al., 2007)		5,41e-10*

Tab. 5 WPDE – slepá predikce – parametry lineární sorpce

	Distribuční koeficient lineární sorpce K_D [m^3/kg]	
	VGN	PGR
HTO	0	
Cl-36	0	
Na-22	0,0013	0,0008
Sr-85	0,0011	
Ba-133	0,06	0,08

3.1.1.4 Výsledky simulací

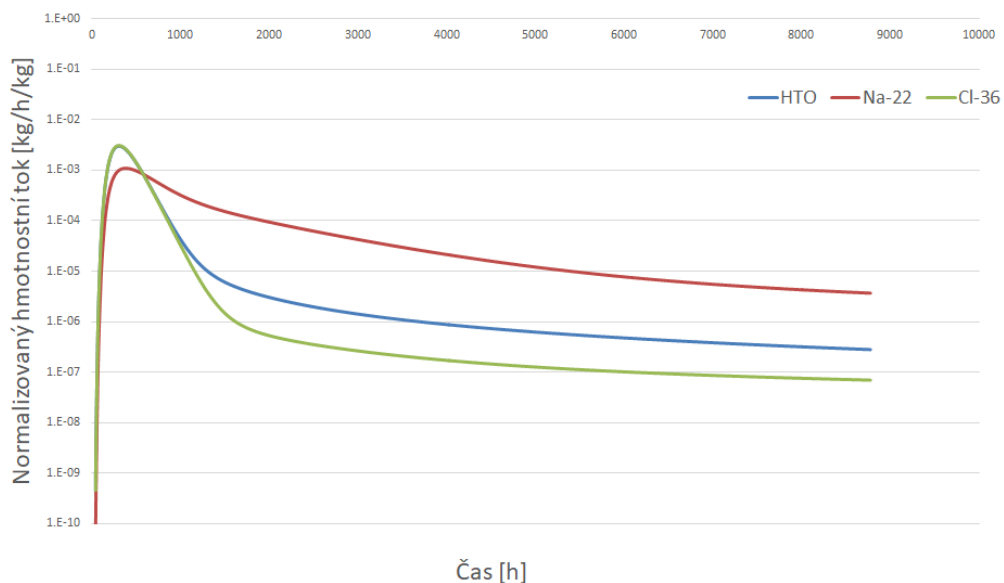
Výstupy modelu jsou reprezentovány průnikovou křivkou z experimentální sekce (v čase posunutou o hodnotu zdokumentovanou v Tab. 2). Jedná se o hmotnostní tok přes hranici normalizovaný injektovaným množstvím stopovače, což má tu výhodu, že odpadne potřeba zpětného přepočtu hmotnosti na aktivitu.

Na Obr. 6 (s lineární časovou škálou) a Obr. 7 (s logaritmickou časovou škálou) jsou znázorněny predikované průnikové křivky experimentu WPDE-1.

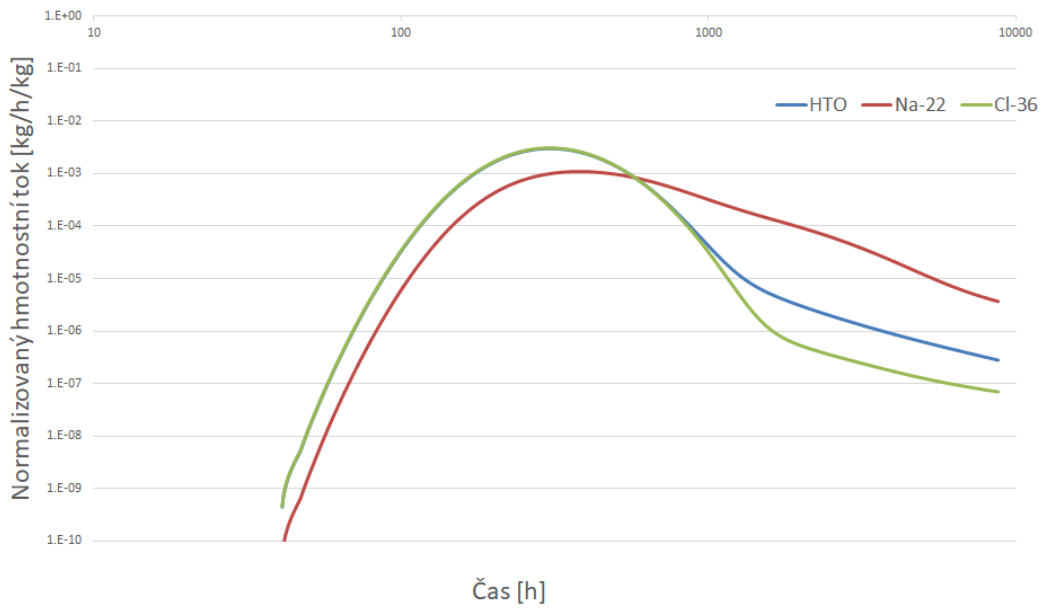
Na Obr. 8 (s lineární časovou škálou) a Obr. 9 (s logaritmickou časovou škálou) jsou znázorněny predikované průnikové křivky experimentu WPDE-2.

Z výsledků simulací obou experimentů je patrné, že konzervativní stopovače dosahují maxima dříve než ty sorbující, což odpovídá předpokladům. Nižší dostupná frakce porozity pro chlor má vliv na průběh sestupné hrany, kde je patrný rychlejší pokles a ustálená hodnota přibližně o půl řádu nižší než u tritia, které stejně jako chlor nesorbují. Sodík i stroncium mají v modelu podobné parametry, proto i jejich průnikové křivky jsou si blízké. Výrazně odlišná je průniková křivka silněji sorbujícího barya, která vykazuje daleko vyšší retardaci. Je třeba podotknout, že teoretický vztah pro odhad retardace na základě znalosti distribučního koeficientu lineární sorpce nelze v tomto případě využít, jelikož voda s rozpuštěnými stopovači neproudí přímo médiem, ve kterém k sorpci dochází.

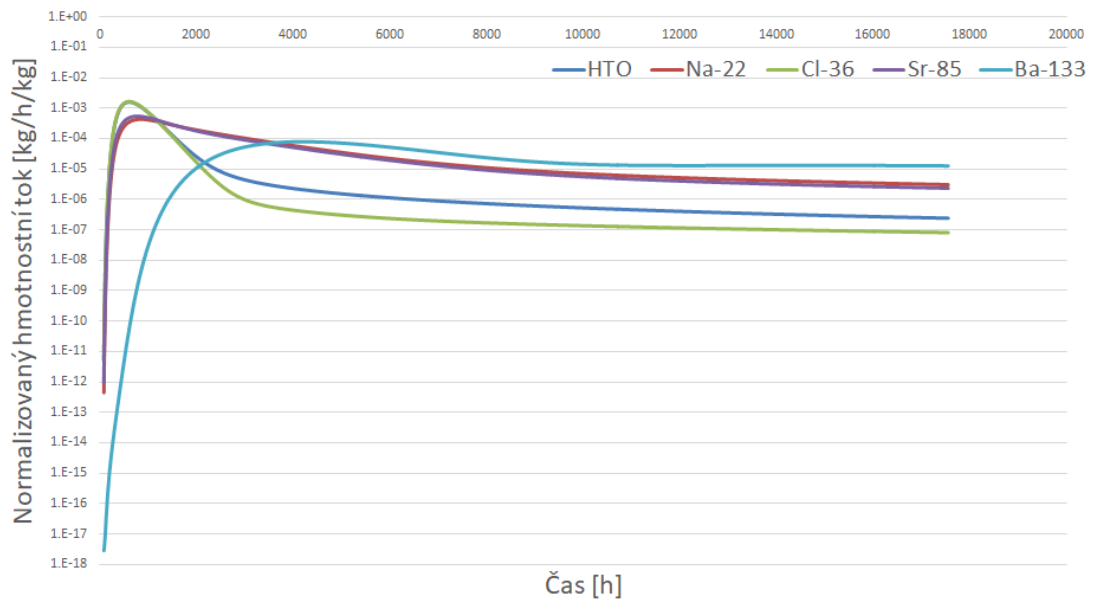
Výsledky všech tří sorbujících stopovačů vypadaly při prvních simulacích výrazně jinak, než je zde prezentováno, průnikové křivky vykazovaly daleko vyšší retardaci. Díky srovnání výsledků našich simulací s výsledky ostatních týmů zúčastněných v GWFTS bylo tato nesrovnalost odhalena a po ověření správnosti matematicko-fyzikálního modelu a jeho vstupů vysvětlena vlivem diskretizace výpočetní domény v blízkosti pukliny. Diskretizace byla následně upravena přidáním dvou tenkých vrstev elementů v horninové matici bezprostředně sousedící s puklinou (viz kapitola 3.1.1.1). Tato úprava dramaticky vylepšila shodu výstupů našeho modelu s výstupy ostatních řešitelů s tím, že pro nejsilněji sorbující stopovač (Baryum) jsou výsledky stále mírně odlišné. I v případě Barya by šlo shodu s ostatními vylepšit dalšími úpravami výpočetní sítě, nicméně ve fázi slepé predikce bylo toto shledáno být nežádoucím, jelikož by se jednalo v principu o fitování modelu na modely ostatních. Vliv jemnosti výpočetní sítě na výsledky Barya tak bude diskutován dále v textu v části zabývající se shodou s měřenými průnikovými křivkami.



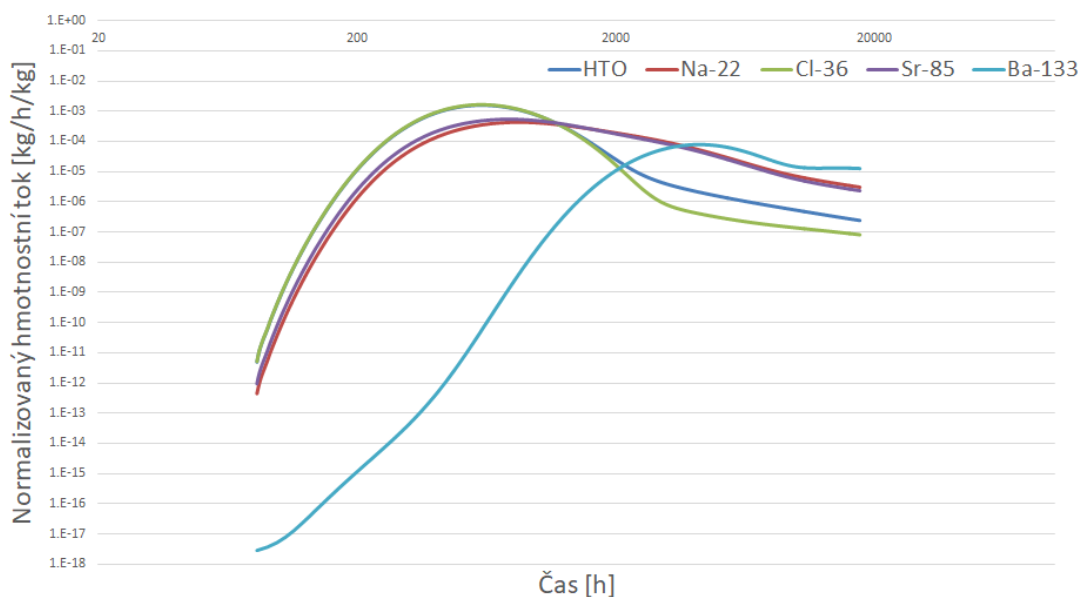
Obr. 6 WPDE_1 – slepá predikce – výsledky (lineární časová škála)



Obr. 7 WPDE_1 – slepá predikce – výsledky (logaritmičká časová škála)



Obr. 8 WPDE_2 – slepá predikce – výsledky (lineární časová škála)



Obr. 9 WPDE_2 – slepá predikce – výsledky (logaritmičká časová škála)

3.1.1.5 Citlivostní analýza

Součástí vyhodnocení prediktivního modelu byla také citlivostní analýza. Omezíme se zde jen na vyhodnocení experimentu WPDE-2, jakkoli lze předpokládat, že citlivosti na jednotlivé parametry modelu by pro experiment WPDE-1 vlivem vyšší rychlosti proudění v puklině byly mírně odlišné. Rozsahy parametrů pro citlivostní analýzu jsou shrnuty v Tab. 6. Minimální a maximální hodnoty byly převážně převzaty ze zadávací dokumentace (rozsahy nejistot měření, případně rozdílné hodnoty z jednotlivých měření vzorků vrtného jádra).

Míra citlivosti modelu na jednotlivé parametry byla hodnocena jednak kvalitativně srovnáním průnikových křivek a jednak kvantitativně pomocí vzorce:

$$s = \frac{\left(1 - \left(\frac{y_2}{y_1}\right)\right)}{\left(1 - \left(\frac{b_2}{b_1}\right)\right)}, \quad (17)$$

kde y_1 je výchozí výstup (pro výchozí hodnotu parametru b_1) a y_2 je upravený výstup (pro upravenou hodnotu parametru b_2). Ve své podstatě se jedná o podíl relativní změny výstupu ku relativní změně vstupu.

Hodnoceny byly tři kvantify popisující průnikovou křivku:

- Pozice maxima průnikové křivky [h],
- hodnota maxima [1/h],
- šířka průnikové křivky počítaná jako časový rozdíl dosažení 50 % hodnoty maxima na náběžné a sestupné hraně [h].

Tab. 6 WPDE-2 – citlivostní analýza – rozsahy parametrů

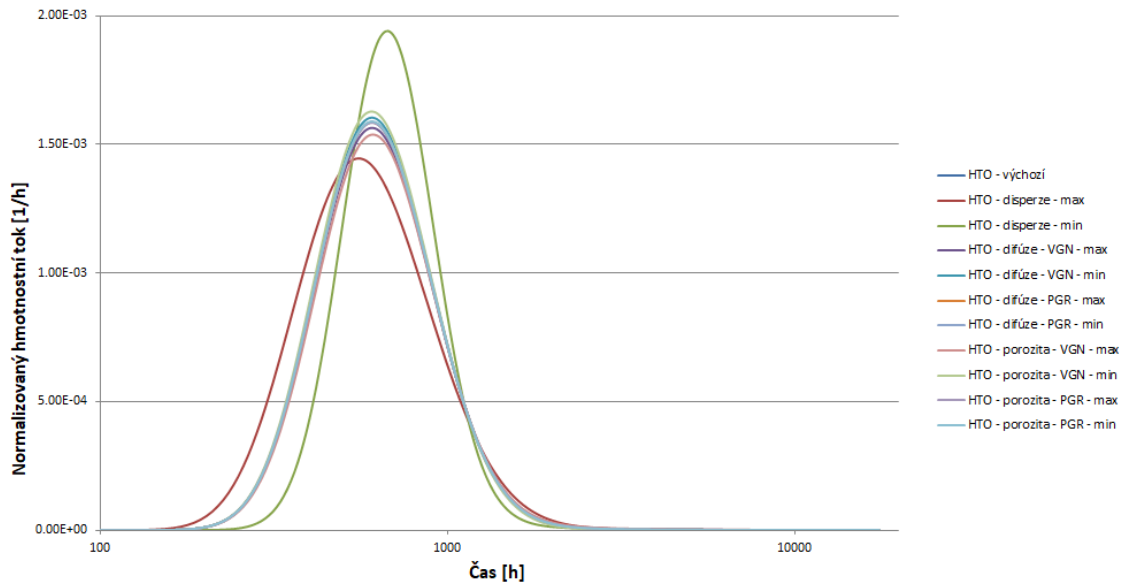
Parametr	Výchozí	Minimum	Maximum
Podélná disperzivita [m]	0,19	0,1	0,28
Porozita VGN [-]	0,0082	0,0011	0,03
Porozita PGR [-]	0,005	0,0026	0,0077
Porozita VGN [-] Cl-36	0,000175	0,0001	0,0006
Porozita PGR [-] Cl-36	0,013	0,011	0,015
K_D Na-22 VGN [m^3/kg]	0,0013	0,001	0,0016
K_D Na-22 PGR [m^3/kg]	0,0008	0,0005	0,0011
K_D Sr-85 VGN [m^3/kg]	0,0011	0,0008	0,0014
K_D Sr-85 PGR [m^3/kg]	0,0011	0,0008	0,0014
K_D Ba-133 VGN [m^3/kg]	0,06	0,04	0,08
K_D Ba-133 PGR [m^3/kg]	0,08	0,06	0,1
D_e HTO VGN [m^2/s]	1,83e-13	1,2e-13	2,8e-13
D_e HTO PGR [m^2/s]	5,7e-13	5,1e-13	6,3e-13
D_e Na-22 VGN [m^2/s]	4,65e-13	3,7e-13	5,6e-13
D_e Na-22 PGR [m^2/s]	4,65e-13	3,7e-13	5,6e-13
D_e Cl-36 VGN [m^2/s]	5e-15	2e-15	8e-15
D_e Cl-36 PGR [m^2/s]	5e-13	4e-13	6e-13
D_e Sr-85 VGN [m^2/s]	3,3e-13	2,5e-13	4,1e-13
D_e Sr-85 PGR [m^2/s]	3,3e-13	2,5e-13	4,1e-13
D_e Ba-133 VGN [m^2/s]	1,47e-13	1,17e-13	1,77e-13
D_e Ba-133 PGR [m^2/s]	1,47e-13	1,17e-13	1,77e-13

Výsledky kvantitativního zhodnocení jsou shrnuty v Tab. 7. Nulové citlivosti jsou zapříčiněny výpočetním krokem (a tedy i krokem zápisu výstupů) simulace, který byl v případě WPDE-2 8 hodin. Rozlišení výstupu tak není dostatečně jemné, aby zachytilo změnu hodnocené kvantity, je-li citlivost malá. Ze stejného důvodu mohou být i nenulové citlivosti mírně nepřesné.

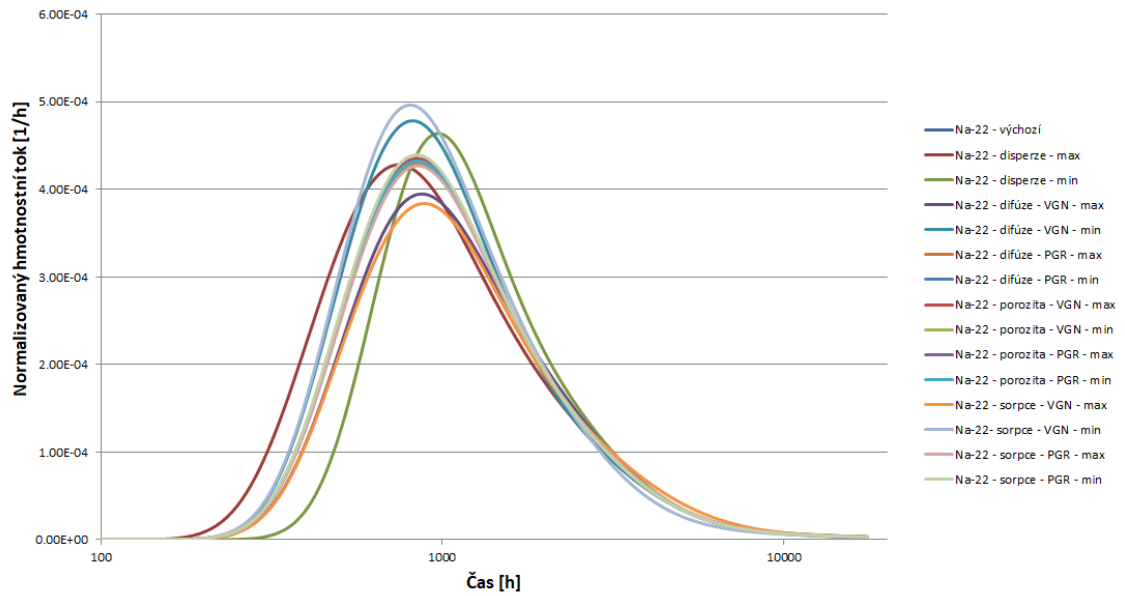
Kvalitativní vyhodnocení citlivostní analýzy je znázorněno na Obr. 10, Obr. 11, Obr. 12, Obr. 13 a Obr. 14.

Tab. 7 WPDE-2 – citlivostní analýza – kvantitativní vyhodnocení

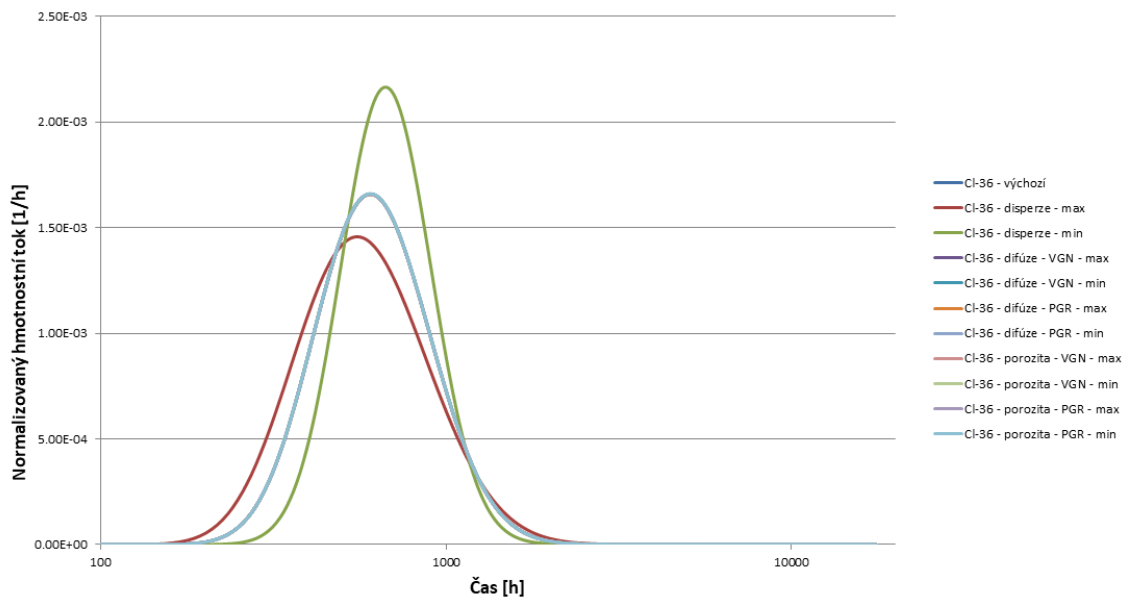
	HTO			Na-22			Cl-36			Sr-85			Ba-133		
	pozice	šířka	hodnota	pozice	šířka	hodnota	pozice	šířka	hodnota	pozice	šířka	hodnota	pozice	šířka	hodnota
Disperzivita max	-1,7e-01	1,8e-01	-1,9e-01	-2,4e-01	-2,5e-02	-2,1e-02	-1,7e-01	1,8e-01	-2,6e-01	-2,4e-01	1,5e-02	-4,2e-02	-2,6e-01	4,6e-02	-1,5e-02
Disperzivita min	-2,5e-01	2,9e-01	-4,7e-01	-3,2e-01	1,2e-01	-1,5e-01	-2,2e-01	3,3e-01	-6,4e-01	-2,8e-01	1,5e-01	-1,7e-01	-3,7e-01	2,2e-01	-2,1e-01
Porozita VGN max	5,0e-03	5,2e-03	-1,1e-02	0,0e+00	-2,2e-03	2,3e-03	0,0e+00	0,0e+00	-2,9e-04	-3,9e-03	-2,7e-03	2,2e-03	-6,4e-03	-6,7e-03	5,8e-03
Porozita VGN min	0,0e+00	0,0e+00	-3,0e-02	0,0e+00	0,0e+00	1,2e-03	0,0e+00	0,0e+00	-5,3e-04	0,0e+00	0,0e+00	-5,2e-04	-6,6e-03	-4,6e-03	4,3e-03
Porozita PGR max	0,0e+00	0,0e+00	-2,2e-03	0,0e+00	0,0e+00	1,2e-04	0,0e+00	0,0e+00	-3,1e-03	0,0e+00	0,0e+00	1,4e-04	0,0e+00	-3,7e-03	4,6e-04
Porozita PGR min	0,0e+00	0,0e+00	-3,0e-03	0,0e+00	0,0e+00	7,8e-05	0,0e+00	0,0e+00	-3,5e-03	0,0e+00	0,0e+00	1,4e-04	0,0e+00	0,0e+00	5,1e-04
Difúze VGN max	2,5e-02	0,0e+00	-2,6e-02	1,4e-01	5,4e-01	-4,3e-01	0,0e+00	0,0e+00	-6,7e-04	8,5e-02	3,2e-01	-3,4e-01	-1,1e-01	-6,8e-02	-6,9e-01
Difúze VGN min	0,0e+00	0,0e+00	-3,2e-02	1,4e-01	4,6e-01	-5,2e-01	0,0e+00	0,0e+00	-8,6e-04	1,7e-01	2,9e-01	-4,4e-01	-1,2e-01	-1,2e-01	-8,3e-01
Difúze PGR max	0,0e+00	0,0e+00	-3,8e-03	4,7e-02	2,9e-02	-2,9e-02	0,0e+00	0,0e+00	-5,2e-03	0,0e+00	2,9e-02	-3,0e-02	-9,3e-03	-9,8e-03	-6,2e-02
Difúze PGR min	0,0e+00	0,0e+00	-4,0e-03	0,0e+00	5,7e-02	-3,3e-02	0,0e+00	0,0e+00	-5,7e-03	4,2e-02	2,9e-02	-3,4e-02	-9,3e-03	-2,0e-02	-6,3e-02
Sorpce VGN max	-	-	-	2,1e-01	3,8e-01	-4,9e-01	-	-	-	1,1e-01	3,4e-01	-4,3e-01	7,9e-01	7,8e-01	-6,3e-01
Sorpce VGN min	-	-	-	2,1e-01	4,1e-01	-6,4e-01	-	-	-	1,9e-01	3,4e-01	-5,5e-01	7,9e-01	7,6e-01	-1e+00
Sorpce PGR max	-	-	-	2,5e-02	1,6e-02	-3,4e-02	-	-	-	0,0e+00	2,6e-02	-4,0e-02	8,4e-02	1,0e-01	-9,6e-02
Sorpce PGR min	-	-	-	0,0e+00	4,7e-02	-4,2e-02	-	-	-	3,8e-02	2,6e-02	-4,4e-02	8,4e-02	1,0e-01	-9,8e-02



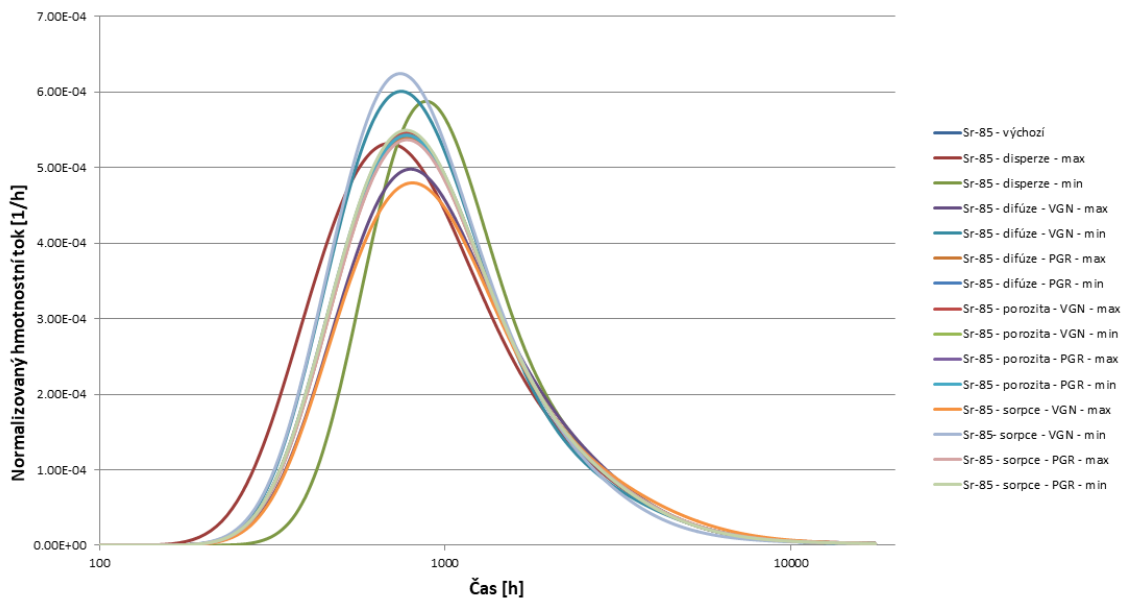
Obr. 10 WPDE-2 – slepá predikce – citlivostní analýza – HTO



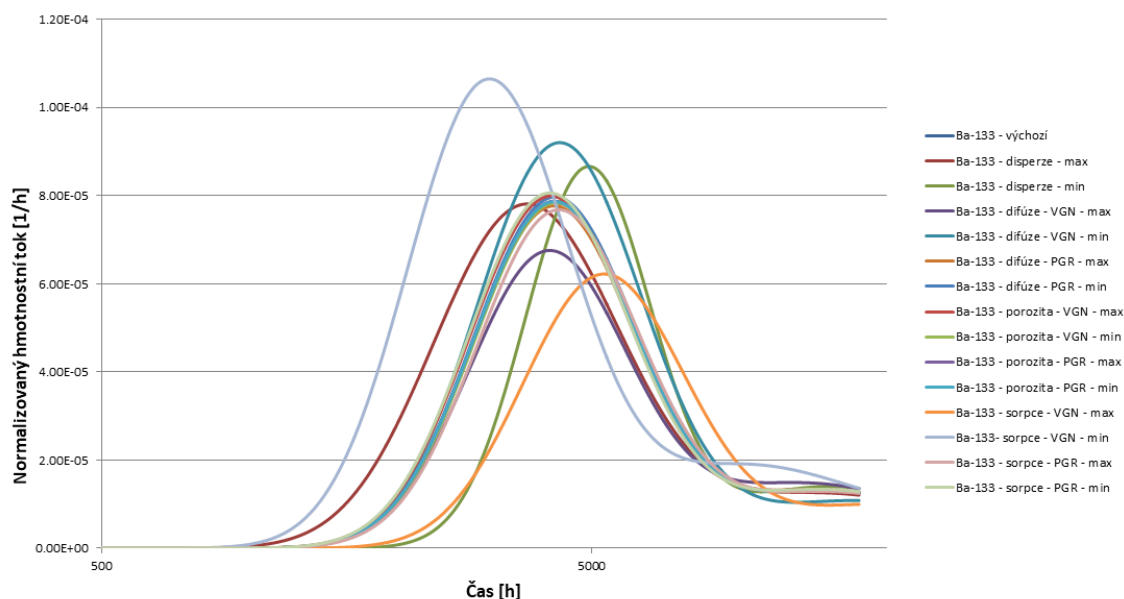
Obr. 11 WPDE-2 – slepá predikce – citlivostní analýza – Na-22



Obr. 12 WPDE-2 – slepá predikce – citlivostní analýza – Cl-36



Obr. 13 WPDE-2 – slepá predikce – citlivostní analýza – Sr-85



Obr. 14 WPDE-2 – slepá predikce – citlivostní analýza – Ba-133

Z kvalitativního a kvantitativního vyhodnocení citlivostní analýzy slepé predikce lze vyvodit čtyři hlavní závěry:

- Průnikové křivky konzervativních stopovačů jsou citlivé především na parametr hydrodynamické disperze.
- Sorbující stopovače jsou citlivé na parametry disperze, difúze a sorpce.
- Citlivosti na porozitu jsou zanedbatelné.
- Citlivosti na parametry PGR zóny jsou výrazně menší než citlivosti na parametry VGN zóny. To není překvapivé vzhledem k tomu, že VGN je dominantní horninový typ.

3.1.2 Fitování modelu na měřená data, doplňující analýzy

Pro všechny níže popsané simulace byla vytvořena nová výpočetní síť, již jen dvojrozměrná. K tomuto bylo přistoupeno s cílem dosáhnout akceptovatelné časové náročnosti, nikoli však na úkor vypovídající schopnosti modelu. Třetí rozměr je emulován parametrem cross_section (parametr Flow123D, představuje mocnost respektive průřez u elementů dimenze menší než 3), jehož hodnota se plynule mění dle předpisu:

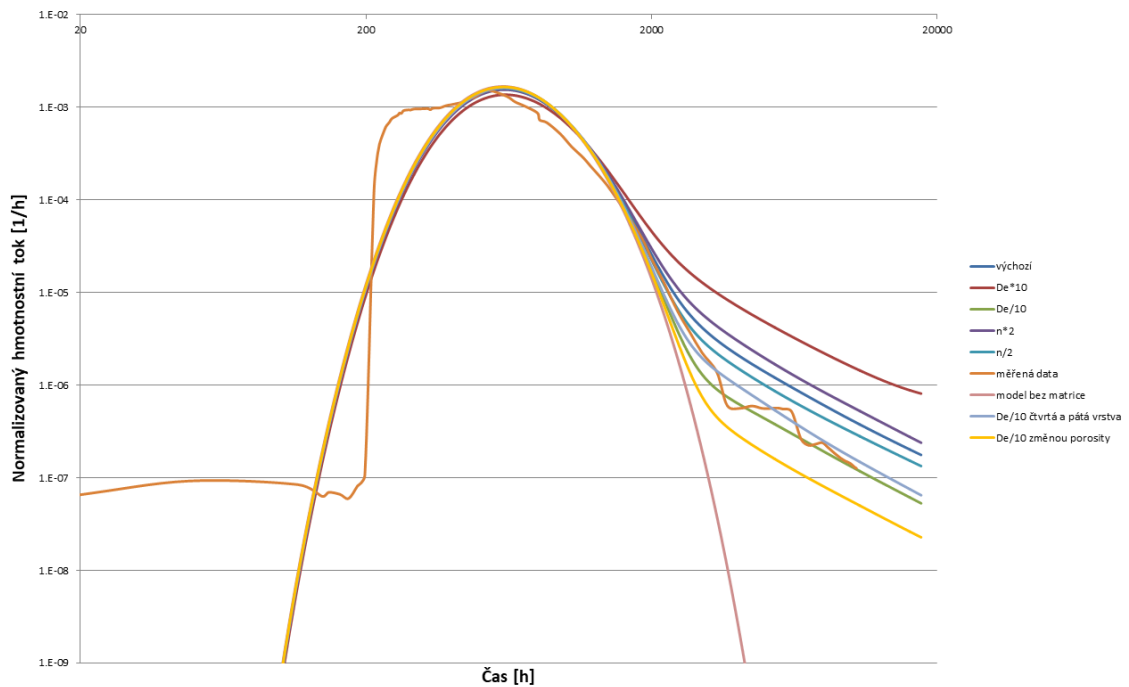
$$cs = 6,2832 \cdot y, \quad (18)$$

což zajišťuje axisymetrii úlohy (směr osy y je kolmý na puklinu). Ekvivalentnost výstupů byla ověřena testovacími výpočty.

Na Obr. 15 je analyzována shoda prediktivního modelu experimentu WPDE-2 (stopovače HTO) s měřenými daty (obě osy grafu jsou v logaritmické škále). Z obrázku

jsou patrné následující věci charakterizující míru shody prediktivního modelu a měřených dat:

- Nenulová hodnota měřených dat od počátku doby simulace – je dána posloupností provedených experimentů, bude diskutováno samostatně dále v textu.
- Náběžná hrana – měřená data stoupají strmě k maximu daleko dříve, než maxima dosahují výsledky simulací. To je podivné, jelikož průtok umělou puklinou byl během celého experimentu monitorován a kolem hodnoty uvedené v zadávací dokumentaci (a použité při simulaci) fluktuuje jen zcela zanedbatelně. Míra vlivu přítomnosti horninové matrice v modelu na průběh náběžné hrany byla otestována simulací samostatné pukliny. Výsledek tohoto modelu je na Obr. 15 znázorněn růžovou křivkou. Je patrné, že zahrnutí horninové matrice má pro konzervativní stopovač vliv jen na průběh sestupné hrany, na hranu náběžnou ani na hodnotu a polohu maxima nemá pozorovatelný vliv. Molekulární difúze i hydrodynamická disperze, které jsou v puklině simulovány, nemají vliv na pozici maxima, jen na jeho hodnotu a na míru rozmytí („šířku“ průnikové křivky). Z toho plyne závěr, že náběžnou hranu měřených dat nelze při stávající konfiguraci modelu experimentu replikovat. Lze se jen domnívat, čím je rychlý nástup koncentrace na výstupu zapříčiněn. Možným vysvětlením je nepřesnost (nesoustřednost) uložení ucpávky vrtu, což mohlo způsobit vznik preferenční cesty. Vliv mohly mít také nepravidelnosti na stěnách vrtu, případně ne zcela horizontální směřování vrtu, ve kterém je experiment instalován (vrt upadá přibližně o deset stupňů).
- Hodnota maxima – zde slepá predikce vykazuje s měřenými daty dobrou shodu.
- Sestupná hrana – parametry horninové matrice mají pro konzervativní stopovač vliv zejména na rychlost poklesu sestupné hrany. Právě na její průběh se proto zaměřují snahy o modelovou reprodukci měřených dat (viz dále).



Obr. 15 WPDE-2 – doplňující simulace, měřená data – HTO

Jelikož je HTO konzervativním stopovačem, je jediným simulovaným procesem v horninové matici molekulární difúze. Pro fitování měřených dat tak byly k dispozici jen dva parametry: efektivní difuzivita D_e a porozita n . Ty jsou navíc ve vnitřní logice simulačního software Flow123D provázány vztahem:

$$D_e = D_w \cdot n \cdot \tau = D_w \cdot n^{4/3}, \quad (19)$$

kde D_w je koeficient difúze ve volné vodě a τ je tortuozita, která je Flow123D bez možnosti uživatelského zásahu počítána jako třetí odmocnina z porozity. Vstupy pro model jsou D_w a n , D_e je na jejich základě dopočítáno interně.

Byla provedena citlivostní analýza, kdy byl měněn jednak parametr porozity na dvojnásobek a na polovinu své výchozí hodnoty a jednak parametr efektivní difuzivity na desetinu a desetinásobek své výchozí hodnoty (změnou D_w). Při změně porozity byla nepřímě měněna také efektivní difuzivita (viz Tab. 8). Výsledky této citlivostní analýzy jsou znázorněny na Obr. 15. Zároveň bylo ověřeno, zda v modelu existuje ekvifinalita v tom smyslu, že nezáleží na tom, měníme-li v zájmu změny efektivní difuzivity (vždy na stejnou výslednou hodnotu) porozitu nebo difuzivitu ve volné vodě. Z Obr. 15 je patrné, že průběh simulované průnikové křivky je výrazně jiný, docílíme-li jedné desetiny výchozí hodnoty efektivní difuzivity změnou D_w (křivka označená „De/10“) nebo změnou n (křivka označená „De/10 změnou porozity“). Změna porozity totiž neznamená jen implikovanou změnu D_e , ale také změnu objemu pórů dostupných pro transport stopovače.

Tab. 8 Vliv změny porozity na efektivní difuzivitu

Změna porozity (multiplikátor)	Implikovaná změna D_e (multiplikátor)
2	2,5198
1/2	$1/(2,5198) = 0,39685$

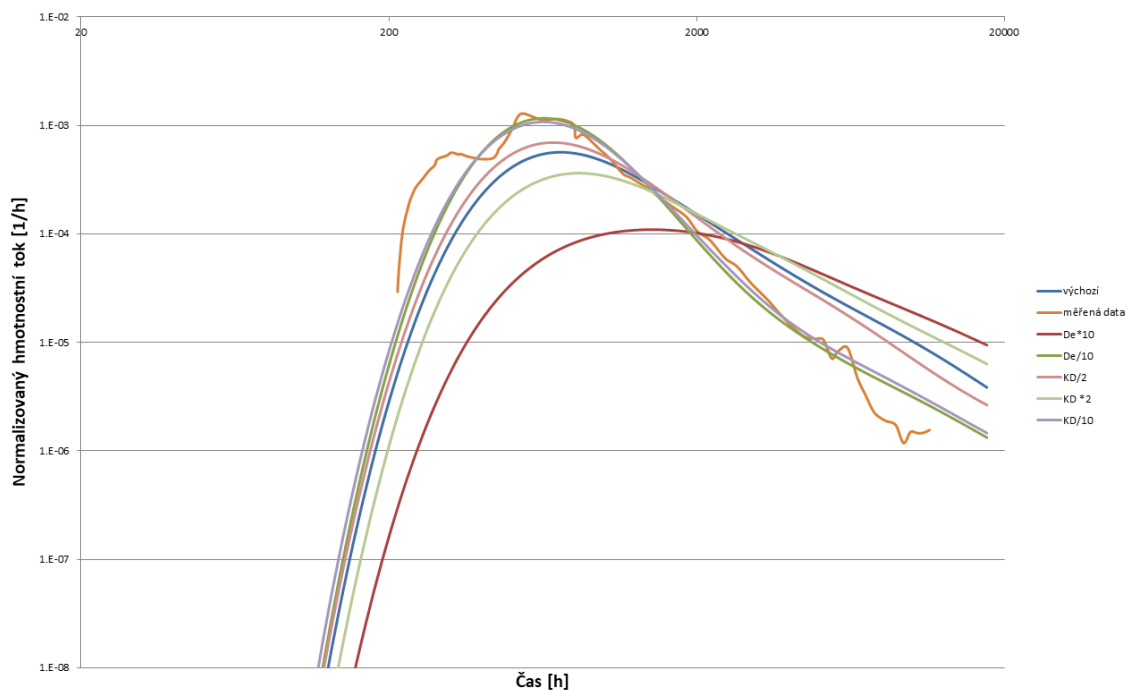
Z Obr. 15 je patrné, že dobré shody s měřenými daty bylo dosaženo tehdy, když byla efektivní difuzivita snížena na jednu desetinu své výchozí hodnoty v celém objemu horninové matrice. Takovou změnu hodnoty, která byla změřena (jakkoli s inherentní nejistotou), by bylo obtížné ospravedlnit. Mohli bychom snadno říci, že reálná hodnota tortuozity je jiná než její hrubý odhad vypočtený jako třetí odmocnina porozity, což do jisté míry může být pravda. Místo toho byla provedena doplňující řada výpočtů, kdy efektivní difuzivita byla měněna jen v části horninové matrice. Za tímto účelem byla výpočetní síť reprezentující horninovou matici rozdělena do soustředných vrstev, jejichž mocnosti jsou uvedeny v Tab. 9. Celková mocnost simulované části horninové matrice je 250 mm. Ze série realizovaných výpočtů vyplynulo, že pro velmi dobrou shodu s měřenými daty (viz Obr. 15) stačí zadat sníženou hodnotu efektivní difuzivity jen ve čtvrté a páté modelové vrstvě. Změna efektivní difuzivity na desetinu výchozí hodnoty byla realizována změnou porozity, což znamená, že od čtvrté vrstvy dál je porozita přibližně pět a půl krát nižší než v prvních třech vrstvách. Vyšší (změřená) hodnota difuzivity je tak použita jen v prvních dvou a čtvrt milimetrech horninové matrice, což dobře koresponduje s teorií, že kolem vrtu, v němž je experiment umístěn, při jeho konstrukci vznikla zóna narušení (BDZ – Borehole Disturbed Zone), v níž je vyšší porozita a úměrně tomu také vyšší efektivní difuzivita. Hodnota efektivní difuzivity uvedená v zadávací dokumentaci byla měřena na vzorcích z vrtného jádra, tedy ne na neporušené hornině. Realitě by v tomto případě pravděpodobně lépe vyhovoval nikoli skokový, ale plynulý pokles porozity s hloubkou, ale na myšlence v pozadí by se tím nic nezměnilo.

Tab. 9 WPDE-2 – rozdělení horninové matrice do vrstev

Vrstva	Mocnost [mm]
1	0,5
2	0,7
3	1,05
4	30
5	217,75

Na Obr. 16 je analyzována shoda s měřenými daty pro vybraný ze sorbujících stopovačů. Simulace všech sorbujících stopovačů vychází ve vztahu k měřeným datům obdobně, omezíme se tak v zájmu stručnosti na jediný, Sr-85. Z obrázku je patrné, že oproti konzervativnímu stopovači jsou průnikové křivky daleko citlivější na parametr

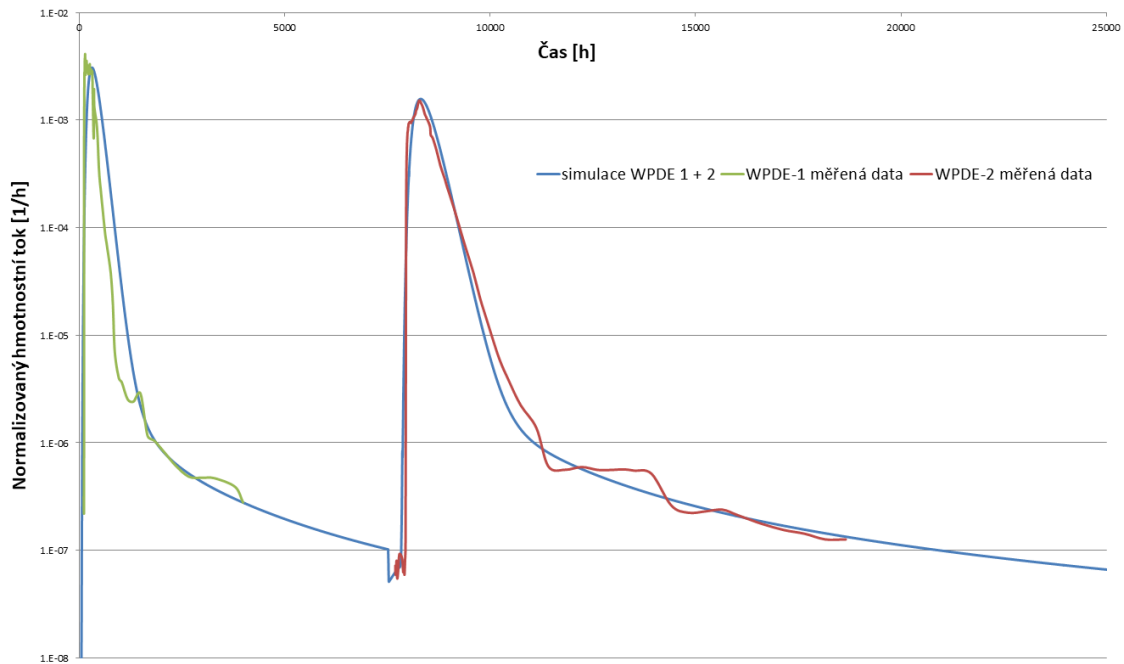
efektivní difúze. Ten neovlivňuje jen rychlost poklesu sestupné části křivky, ale také hodnotu maxima a čas jeho dosažení. I pro sorbující stopovač bylo snížením efektivní difuzivity na jednu desetinu dosaženo dobré shody s měřenými daty. To je důležité, jelikož by bylo obtížně ospravedlnitelné používat různé hodnoty porozity pro různé stopovače ve stejné horninové matici (přirozeně není-li na místě předpokládat aniontovou exkluzi). Zajímavé je, že velmi dobré shody bylo dosaženo také při simulaci s desetinovou hodnotou distribučního koeficientu lineární sorpce oproti hodnotě výchozí. To by izolovaně bylo možné zdůvodnit tím, že K_D je měřeno na nadrcené části vrtného jádra, v neporušené hornině tak lze předpokládat hodnoty nižší. Zdůvodnění pomocí poklesu porozity (a implikované změny D_e) je nicméně věrohodnější, protože je konzistentní pro všechny stopovače. Stejně jako u HTO, i u Sr-85 má měřená průniková křivka výrazně rychlejší nástup než křivky simulované. Možná zdůvodnění jsou stejná jako ta, která byla uvedena u analýzy výsledků HTO.



Obr. 16 WPDE-2 – doplňující simulace, měřená data – Sr-85

Oba dva experimenty (WPDE-1 i WPDE-2) byly provedeny sekvenčně po sobě ve stejné experimentální sekci. Jelikož všechny tři stopovače z prvního experimentu byly použity i v tom druhém (spolu s dalšími dvěma), je třeba ověřit, jaký vliv na výsledek simulace má jejich zbytkové množství v horninové matici. Na Obr. 17 je znázorněn výsledek tohoto ověření pro HTO spolu s měřenými daty z obou experimentů. Simulace obou experimentů byly provedeny s desetinovou hodnotou efektivní difuzivity oproti výchozí hodnotě (v celém objemu horninové matrice). Simulační periody uvedené v zadávací dokumentaci nemohly být dodrženy, jelikož druhý experiment byl reálně zahájen ještě během simulační periody toho prvního. Časová osa tohoto sekvenčního modelu tak vychází z reálné datace s jedinou drobnou nejistotou spočívající v tom, že se nepodařilo

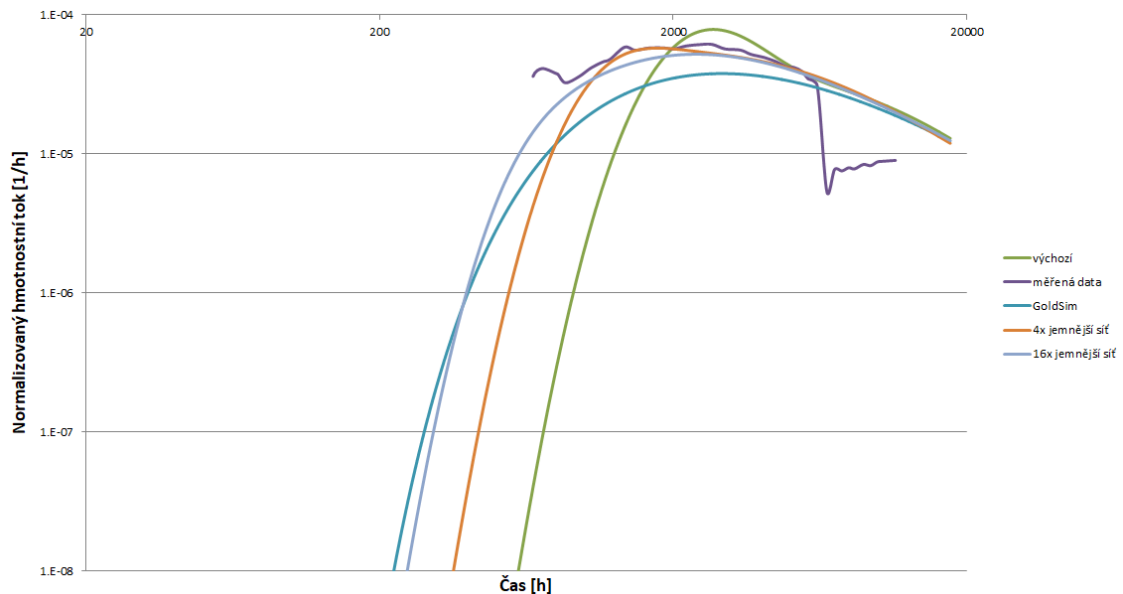
dohledat, kdy přesně byl změněn průtok umělou puklinou (ve výsledcích simulace je čas této změny velmi dobře patrný skokovým poklesem výstupu na poloviční hodnotu). Chyba odhadu by však měla být maximálně v řádu jednotek dnů. Z Obr. 17 je patrné, že byla zachována velmi dobrá shoda modelu s měřenými daty a že se navíc podařilo vysvětlit nenulovou hodnotu náběžné hrany na počátku experimentu WPDE-2. Zbytkové množství HTO přítomné v horninové matici před zahájením druhého z experimentů však celkově na výsledky jeho modelu nemělo pozorovatelný vliv.



Obr. 17 WPDE – sekvenční simulace obou experimentů – výsledky – HTO

Výše v textu byl zmíněn silný vliv diskretizace horninové matrice v blízkém okolí pukliny (tedy na rozhraní dvou prostředí s výrazně odlišnými vlastnostmi). Na Obr. 18 je znázorněn tento vliv pro nejsilněji sorbující stopovač, Ba-133. Zelená křivka reprezentuje výsledek simulace provedené na základní variantě výpočetní sítě zahrnující dvě tenké vrstvy elementů horninové matrice obklopující puklinu, která byla použita shodně pro všechny stopovače. Dále jsou na obrázku reprezentovány výsledky simulací na upravených sítích, kdy jejich postupné zjemňování má za následek posouvání náběžné hrany směrem doleva a zároveň pokles maximální hodnoty hmotnostního toku. Pro srovnání je na obrázku znázorněn také výsledek modelu GoldSim (realizovaný na pracovištích dalších řešitelů, viz Hokr et al., 2015), jemuž se výsledky modelu Flow123D s postupně se zjemňující výpočetní sítí blíží. Pro simulace slaběji sorbujících stopovačů byla výchozí diskretizace dostačující, zjemnění sítě na ně již nemělo žádný pozorovatelný vliv. Nejlepší shody s měřenými daty bylo dosaženo s 4x jemnější sítí oproti výchozí variantě, tomu ale není na místě přikládat příliš velkou váhu, jelikož prezentované výstupy pochází z modelu s parametry použitými pro slepou predikci, tedy bez úpravy efektivní difuzivity, která u zbývajících stopovačů zajistila zlepšení shody modelu s měřenými daty. Z tohoto srovnání lze vyvodit závěr, že na

rozhraní puklina/hornina je třeba věnovat zvýšenou pozornost diskretizaci, obzvláště při simulaci transportu silněji sorbujících stopovačů. Nelze ovšem předem říci, jaká míra diskretizace je dostatečná. Rozhodně není na místě paušálně používat přemrštěně jemnou síť, protože rostoucí počet elementů si při simulaci vybírá svou daň v podobě dlouhých výpočetních časů a paměťové náročnosti.



Obr. 18 WPDE-2 – Ba-133 – vliv diskretizace, srovnání s měřenými daty a výsledky modelu GoldSim

3.1.3 Závěry pro simulaci transportních procesů v geosféře

Ze simulací experimentů WPDE lze pro modely transportních procesů v rozpukaném porézním prostředí zobecněně vyvodit některé dílčí závěry. Uvažujeme-li, že advektivní tok dominuje v puklinách a že horninová matrice má funkci hlavně retardační mechanismy molekulární difúze a sorpce, pak lze říci že:

- Pro konzervativní stopovače – parametr molekulární difúze nemá výrazný vliv na míru retardace. Je-li zdroj stopovače v modelu reprezentován počátečním rozložením koncentrace nebo časově ohraničeným zdrojovým prvkem, pak je vliv hodnoty efektivní difuzivity významný pro charakter sestupné hrany průnikové křivky.
- Pro sorbující stopovače – parametry molekulární difúze i lineární sorpce mají silný vliv na míru retardace (vyšší efektivní difuzivita i vyšší distribuční koeficient lineární sorpce shodně znamenají vyšší míru retardace). Jsou-li oba tyto parametry použity při kalibraci modelu, je patrná ekvifinalita modelů. Každá případná změna hodnoty parametru musí být fyzikálně odůvodnitelná.
- Hodnoty parametrů – jsou-li při simulaci použity hodnoty tabelované v dostupné literatuře, je třeba vnímat, jakým způsobem byly měřeny. Hodnoty získané z rozdrčených vzorků jader pravděpodobně nebudou stejné jako v neporušené hornině.

- EDZ, BDZ – jsou-li transportní procesy simulovány v prostředí, kde se nacházejí vrty či rozrážky, je pravděpodobné, že v jejich bezprostřední blízkosti bude hornina narušena a že v této zóně narušení bude mít horninová matrice jiné parametry (jak difúzní tak i sorpční).
- Diskretizace – na rozhraní puklina/hornina je třeba věnovat zvýšenou pozornost diskretizaci, obzvláště při simulaci transportu silněji sorbujících stopovačů. Může mít výrazný vliv na přesnost výstupů modelu.

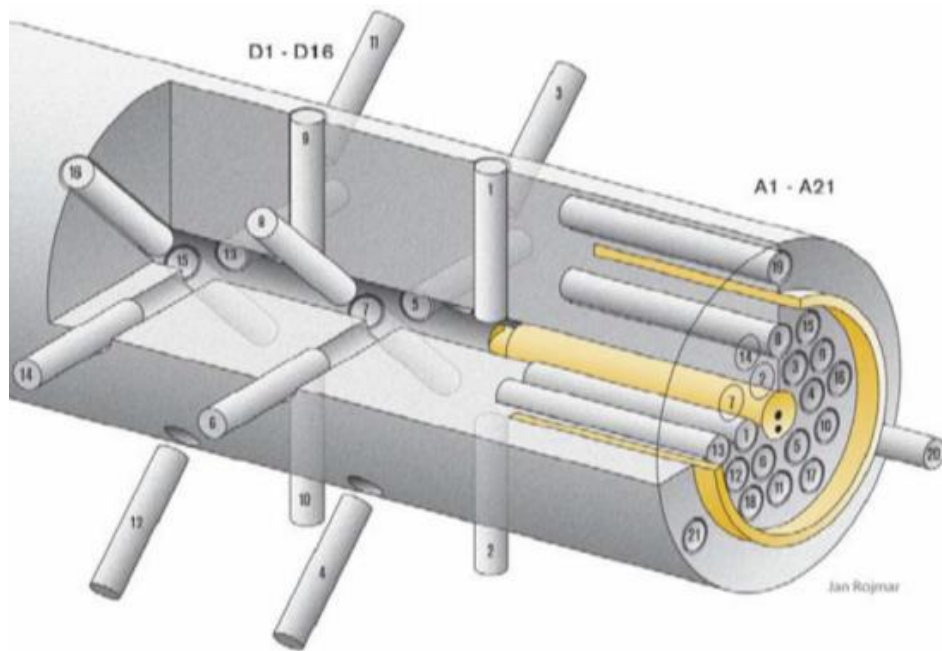
Výsledky simulací a z nich plynoucí závěry byly publikovány v souhrnné zprávě SKB (Soler et al., 2017), již je autor této disertační práce spoluautorem.

3.2 LTDE-SD experiment

LTDE-SD (Long Term Sorption Diffusion Experiment) je difúzně-sorpční experiment realizovaný v hloubce přibližně 400 m v podzemní laboratoři v Äspö ve Švédsku.

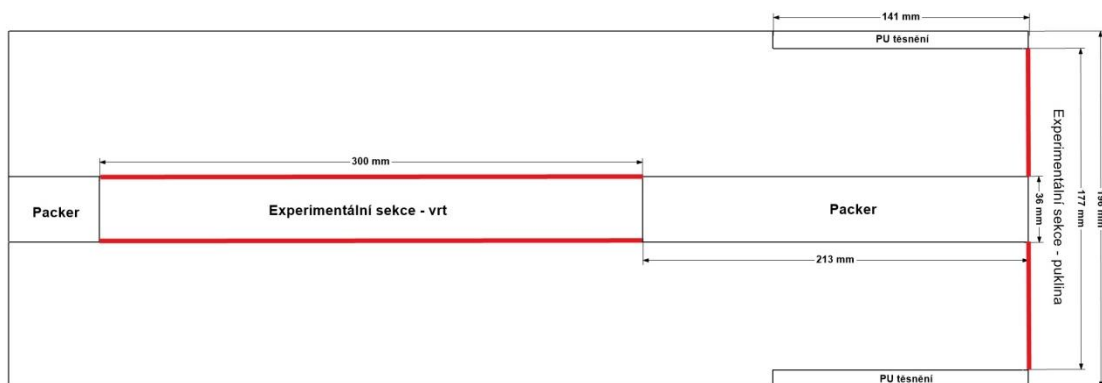
Níže uvedené vychází ze zadávací dokumentace (Lofgren et al., 2015b).

Cílem experimentu bylo změřit koncentrační profily vybraných stopovačů v hornině, která je v kontaktu s jejich roztokem. V horninovém bloku byla identifikována puklina s hydraulickou funkcí. Vrt pro umístění experimentu byl následně veden s postupně se snižujícím poloměrem tak, aby dosáhl roviny pukliny a následně ji pomocí speciálního pohárkového zařízení proťal a o několik centimetrů přesáhl. Vzniklý přesah byl využit pro zapakování (pomocí PU těsnění) části experimentální sekce, která je v kontaktu s puklinou. Z roviny pukliny byl následně veden vrt s výrazně menším průměrem, v němž byla pomocí pakrů následně vytvořena druhá experimentální sekce. Na Obr. 19 je znázorněno schéma konfigurace experimentu. Žlutě jsou zvýrazněny pakry, rovina pukliny je na obrázku vpravo. Válce označené D1 – D16 a A1 – A21 představují jádra, která byla po ukončení experimentu rozřezána a analyzována.



Obr. 19 Schéma konfigurace experimentu LTDE-SD (převzato z Lofgren et al., 2015b)

Na Obr. 20 jsou znázorněny rozměry a umístění experimentálních sekcí (jejich kontakt s horninou zvýrazněn červeně) a pakrů. V experimentální sekci – vrt byla koaxiálně umístěna ucpávka o průměru 26 mm, objem této experimentální sekce tak činí 146 ml, plocha (povrch pláště válce) jejího kontaktu s puklinou je $0,034 \text{ m}^2$. Mocnost experimentální sekce – puklina je 3,25 mm, její objem tak činí 80 ml a plocha (obsah mezikruží) jejího kontaktu s horninou je $0,0236 \text{ m}^2$. Experimentální sekce byly vzájemně propojeny, během experimentu v nich probíhala nucená cirkulace. Jejich celkový objem včetně přívodních trubnic a jiných obslužných částí je 1140 ml.



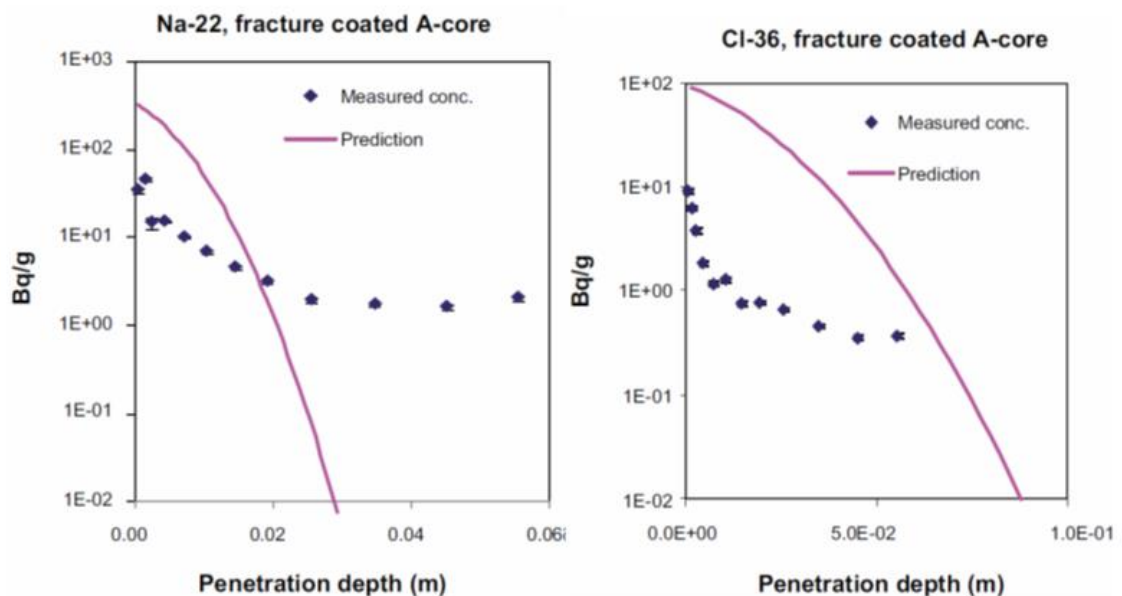
Obr. 20 LTDE-SD – rozměry a umístění experimentálních sekcí

V roztoku, který experimentálními sekcemi po stanovenou dobu cirkuloval, bylo rozpuštěno známé počáteční množství stopovačů. Ty se molekulární difúzí dostávaly do horninové matrice, kde některé z nich navíc sorbovaly. Po ukončení experimentu byla hornina kolem něj obvrtna a vzorky z ní po určité době rozřezány a analyzovány. Tím

byly získány profily vývoje aktivity (koncentrace) jednotlivých stopovačů s hloubkou (vzdáleností od kontaktu s roztokem).

Výsledky experimentu jsou zajímavé proto, že změřené koncentrační profily byly jiné, než bylo očekáváno. Ve (Widstrand et al., 2010) je popsán prediktivní model koncentračních profilů a v (Nilsson et al., 2010) je popsán model inverzní. Bez ohledu na zvolené parametry, rozdíl mezi výsledky modelů a naměřenými profily byl značný (Obr. 21). Oba výše zmíněné modely používaly Fickovskou difúzi v homogenním médiu spolu s lineární sorpcí. Naším úkolem bylo navrhnout takový, který bude naměřené profily schopen replikovat a jehož koncept a použité parametry budou fyzikálně vysvětlitelné a obhajitelné.

Nejedná se o první in-situ experiment, kde byly takové profily získány. Zdokumentován (Soler et. Al. 2015) je například také podobný experiment realizovaný v Grimselu ve Švýcarsku v rámci projektu GTS-LTD (Grimsel Test Site – Long Term Diffusion).



Obr. 21 Výsledky in-situ difúzního experimentu LTDE-SD – koncentrační profily pro Na-22 a Cl-36 – měřená data vs. Model. Převzato z (Nilsson et al. 2010, Obrázky 4-1a a 4-2a).

3.2.1 LTDE-SD simulace

Při simulaci experimentu jsme nejprve použili model s difúzí a lineární sorpcí v homogenním médiu. Výstupy modelu (koncentrační profily) se kvalitativně shodovali s průběhy znázorněnými fialově na Obr. 21, jak bylo lze očekávat. Potvrdilo se tak, že budeme-li chtít vylepšit shodu s měřenými daty, bude třeba zanést do modelu určitou míru heterogenity.

V souladu s instrukcemi koordinátorů pracovní skupiny GWFTS byly simulace rozděleny do dvou etap:

- Etapa_1 – úkolem bylo replikovat změřené profily koncentrací (aktivit) v horninové matici. Koncentrace stopovačů v roztoku (jejich časový vývoj) převzaty ze zadávací dokumentace (Lofgren at al., 2015b) – měřené hodnoty.
- Etapa_2 – převezme parametry z Etapy_1. Model bude rozšířen o simulaci vývoje koncentrací stopovačů v roztoku, bude sledována hmotnostní bilance.

3.2.1.1 Etapa_1

Bylo simulováno 6 stopovačů (Na-22, Cl-36, Co-57, Ni-63, Ba-133 a Cs-137). Pro každý z nich byly k dispozici 4 měřené profily, dva odvrtnané z experimentální sekce – puklina (jádra A) a dva z experimentální sekce – vrt (jádra D). Pro kalibraci modelu v první etapě jsme použily jen profily z jader A, jelikož jejich simulace bylo možno provádět v 1D, což při mnohačetném spouštění modelu spojeném s kalibrací znamenalo významnou časovou úsporu. Charakter měřených profilů koncentrací je pro jádra A i D shodný, z čehož jsme vyvodili, že parametry modelu získané při kalibraci jader A budou přenositelné i pro jádra D.

Snahu o modelové postižení měřených profilů jsme založili na předpokladu přítomnosti zóny narušení v blízkosti vrtu (BDZ). Horninu jsme tak uvažovali heterogenní ve smyslu parametrů měnících se spojitě s rostoucí hloubkou (vzdáleností od vrtu/roviny pukliny).

Geometrií modelu je linie dlouhá 0,1475 m. Její výpočetní síť je ekvidistantní s krokem 0,1 mm. Modelová doména byla rozdělena do tří subdomén (fyzických skupin), abychom měli více stupňů volnosti při předepisování parametrů modelu. Hranice mezi subdoménami byly definovány v hloubce 3 a 25 mm (respektive 3 a 30 mm pro Cl-36).

Simulovány byly procesy difúze a lineární sorpce.

Simulační perioda byla 434 dní. Horninová matrice byla v kontaktu s roztokem prvních 189 dní. Ve zbytku periody je simulována jen difúze v samotné matici s nulovým hmotnostním tokem přes hranici (celková hmotnost jednotlivých stopovačů v matici se již nemění). Tím je postižen jak samotný experiment, tak i čas mezi ukončením experimentu a analýzou vzorků, během něž byla jádra zabalena a uskladněna.

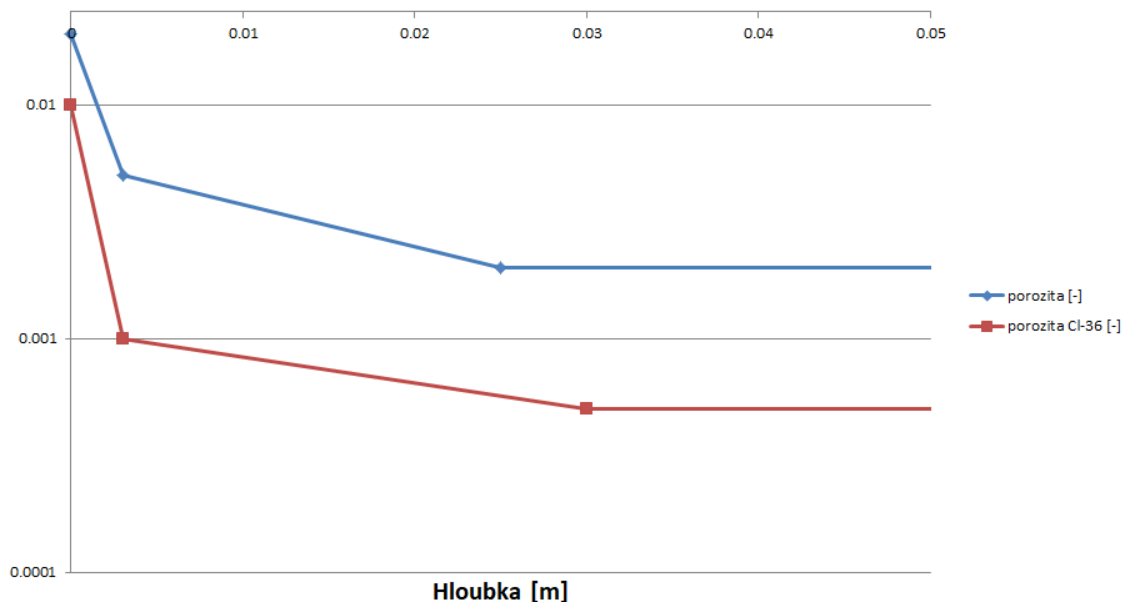
Transport stopovačů (radionuklidů) v horninové matici je řízen třemi parametry (porozita, efektivní difuzivita a distribuční koeficient lineární sorpce). Jejich hodnoty byly předmětem kalibrace, která byla prováděna manuálně s cílem postihnout trend měřených koncentračních profilů spíše než jejich přesné hodnoty, v kterémžto případě by byla vhodnější kalibrace automatická.

Radioaktivní rozpad nebyl uvažován, jelikož všechny změřené aktivity uvedené v zadávací dokumentaci byly přepočteny na hodnoty, jaké by odpovídaly nerozpadajícímu se stopovači.

Porozita byla uvažována jako lineárně klesající s rostoucí hloubkou (vzdáleností od stěny vrtu) v prvních dvou fyzických skupinách, v té třetí již zůstává konstantní. Její hodnoty, již jako výsledky kalibrace, jsou uvedeny v Tab. 10 a znázorněny na Obr. 22. Podstatné je, že pro všechny stopovače byla použita stejná hodnota porozity. Výjimkou je CI-36, u něhož předpokládáme projevující se aniontovou exkluzi.

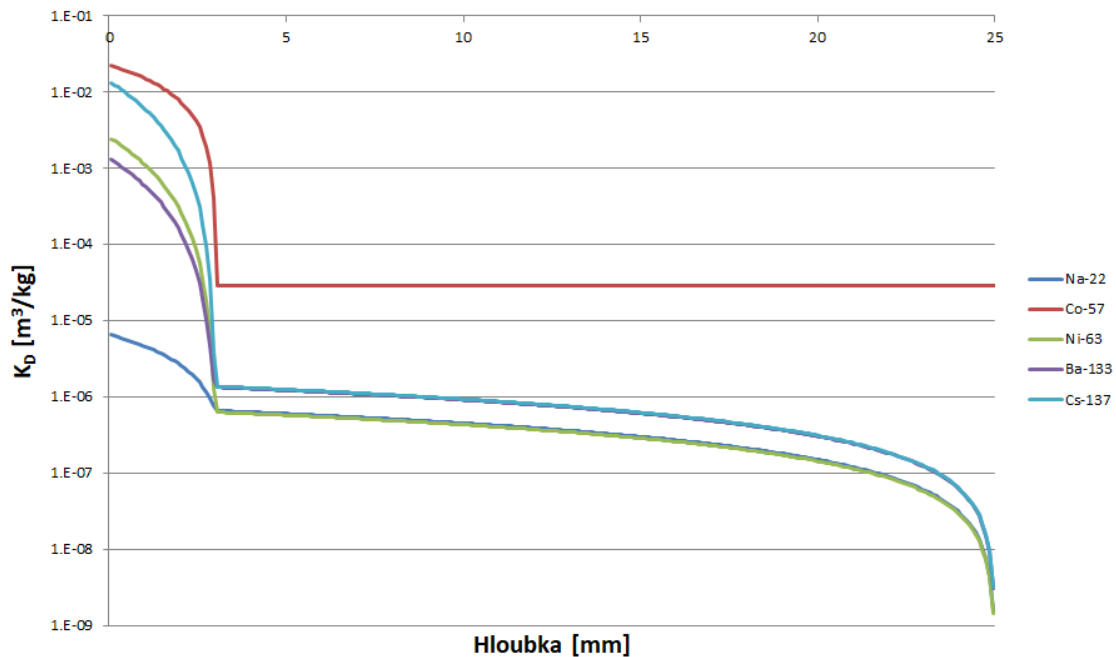
Tab. 10 LTDE-SD – závislost hodnoty porozity na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu)

Hloubka [m]	Porozita [-]	Hloubka [m]	Porozita CI-36 [-]
0	0,02	0	0,01
0,003	0,005	0,003	0,001
0,025	0,002	0,03	0,0005
0,1475	0,002	0,1475	0,0005



Obr. 22 LTDE-SD – závislost hodnoty porozity na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu)

Distribuční koeficient lineární sorpce také klesá s rostoucí hloubkou: strmě v první fyzické skupině, pomaleji (nebo také vůbec) ve druhé, ve třetí pak zůstává konstantní. CI-36 je simulován jako konzervativní stopovač. Jeho hodnoty (výsledky procesu kalibrace) jsou znázorněny na Obr. 23 (v závislosti na hloubce, pro první dvě fyzické skupiny).



Obr. 23 LTDE-SD – závislost hodnoty distribučního koeficientu lineární sorpce na hloubce (vzdálenosti od stěny vrtu)

Posledním parametrem je efektivní difuzivita, která je počítána z difuzivity ve volné vodě, tortuozity a porozity dle vztahu uvedeného v kapitole 3.1.2. Hodnota difuzivity ve volné vodě je pro každý ze stopovačů vždy konstantní v celé výpočetní oblasti (Tab. 11, výsledky procesu kalibrace). Jelikož hodnota efektivní difuzivity je závislá na porozitě, jejíž hodnota se mění s hloubkou, mění se s hloubkou i hodnota efektivní difuzivity.

Tab. 11 LTDE-SD – hodnoty difuzivity ve volné vodě pro jednotlivé stopovače

Stopovač	Difuzivita ve volné vodě [m ² /s]
Na-22	5e-10
Cl-36	1,462e-9
Co-57	2e-9
Ni-63	5e-10
Ba-133	2e-9
Cs-137	2e-9

Na Obr. 24, Obr. 25, Obr. 26, Obr. 27, Obr. 28 a Obr. 29 jsou znázorněny simulované koncentrační profily (výsledky zkalibrovaného modelu) spolu s profily naměřenými na jádrech A6 a A9 (viz Obr. 19). Na každém z obrázků jsou vlevo profily v lineární škále, které lépe dokumentují vývoj (strmý pokles) koncentrace v prvních několika milimetrech horninové matrice, a vpravo ve škále logaritmické, kde je lépe vidět shoda modelu s měřenými daty ve větší vzdálenosti od kontaktu horniny s roztokem

stopovačů. Měřené koncentrační profily byly tabelovány v jednotkách [Bq/g]. Výstupy modelu, koncentrace v kapalně fázi, tak bylo třeba pro srovnání přepočíst dle vztahu:

$$c = c_l \cdot a \cdot \frac{n + K_D \cdot \rho_S}{\rho_l \cdot n + \rho_S}, \quad (20)$$

kde c [Bq/g] je výsledná koncentrace, c_l [kg/m³] je koncentrace v kapalně fázi (výstup Flow123D), a [Bq/g] je specifická aktivita, K_D [kg/m³] je distribuční koeficient lineární sorpce, n [-] je porozita, ρ_S [kg/m³] je hustota horniny a ρ_l [kg/m³] je hustota kapaliny (vody).

Lze říci, že bylo dosaženo relativně dobré shody s měřenými daty. Lepší shody by bylo lze docílit další kalibrací nebo rozdělením výpočetní domény na více než tři fyzické skupiny, což by zvýšilo počet stupňů volnosti modelu (kalibrovatelných parametrů). Jelikož ale přesnost, s jakou byly profily změřeny, je diskutabilní (to je patrné například na oscilacích v měřených datech), nedávalo by valný smysl snažit se docílit dokonalejší shody. Podstatnou věcí je vystižení trendu.

Otevřenou otázkou zůstává realističnost použitých parametrů, které byly získány procesem manuální kalibrace. Pokles porozity a distribučního koeficientu lineární sorpce v prvních vrstvách simulační domény je vysvětlitelný přítomností BDZ – v blízkosti kontaktu s roztokem stopovačů může být hornina rozrušena pracemi provázejícími přípravu experimentu. To mohlo způsobit zvýšení porozity a v souvislosti s tím také nárůst sorpčního koeficientu způsobený vyšším dostupným sorpčním povrchem. Toto možné vysvětlení je v souladu se závěry některých z modelářských týmů hodnotících výsledky výše zmíněného experimentu realizovaného v podzemní laboratoři v Grimselu (Soler et al., 2015).

Je třeba zmínit, že, jak plyne z principu ekvifinality, nalezená kombinace parametrů pravděpodobně není jediná, která poskytne dobrou shodu mezi modelem a měřenými daty. Je například možné, že pokles porozity by měl být strmější, přičemž pokles parametru sorpce má být naopak mírnější.

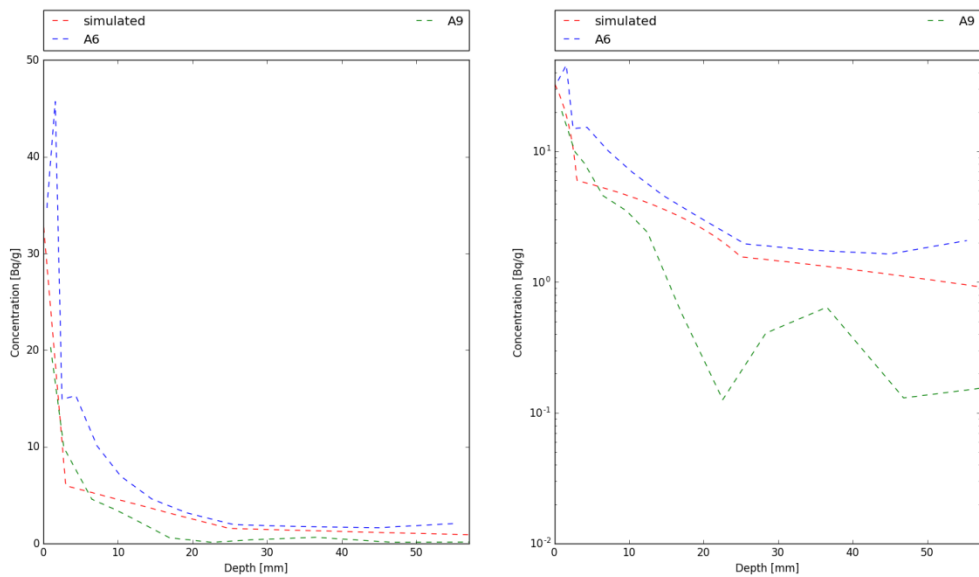
S cílem ověřit, nejsou-li v modelu použité parametry nesmyslné, byla pro každý stopovač spočtena zdánlivá difuzivita (včetně jejího vývoje v závislosti na hloubce) dle vztahu:

$$D_a = D_w \cdot \frac{\tau}{R} = D_w \cdot \frac{\tau}{1 + \frac{\rho_S \cdot K_D}{n}}, \quad (21)$$

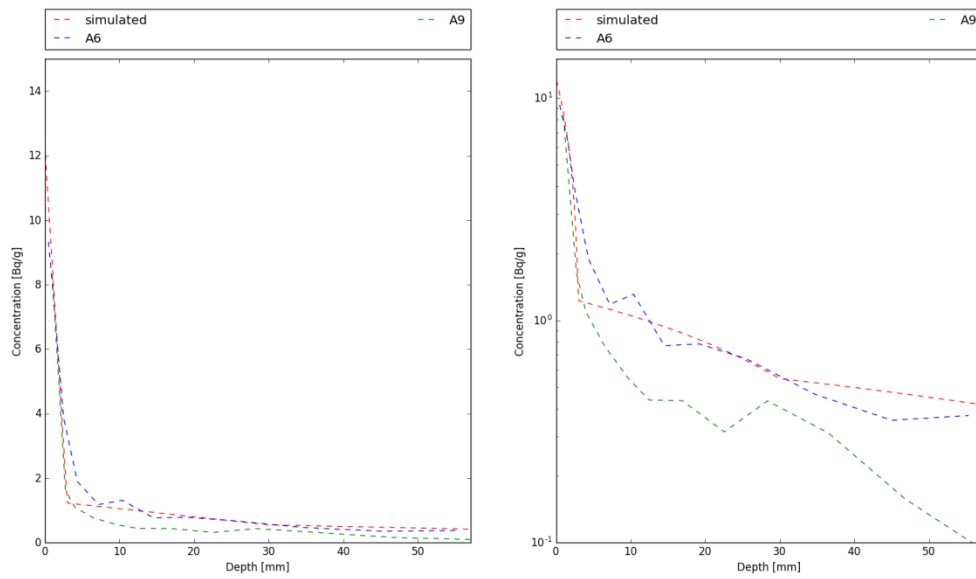
kde R [-] je retardace. Pro žádný ze stopovačů v libovolné hloubce nesmí být zdánlivá difuzivita vyšší než difuzivita ve volné vodě. Potvrzení splnění tohoto kritéria je uvedeno v Tab. 12. To přirozeně nedokazuje, že použité parametry jsou správné, jen to, že nejsou v rozporu s fyzikálními.

Tab. 12 LTDE-SD – srovnání maximální hodnoty zjevné difuzivity s difuzivitou ve volné vodě

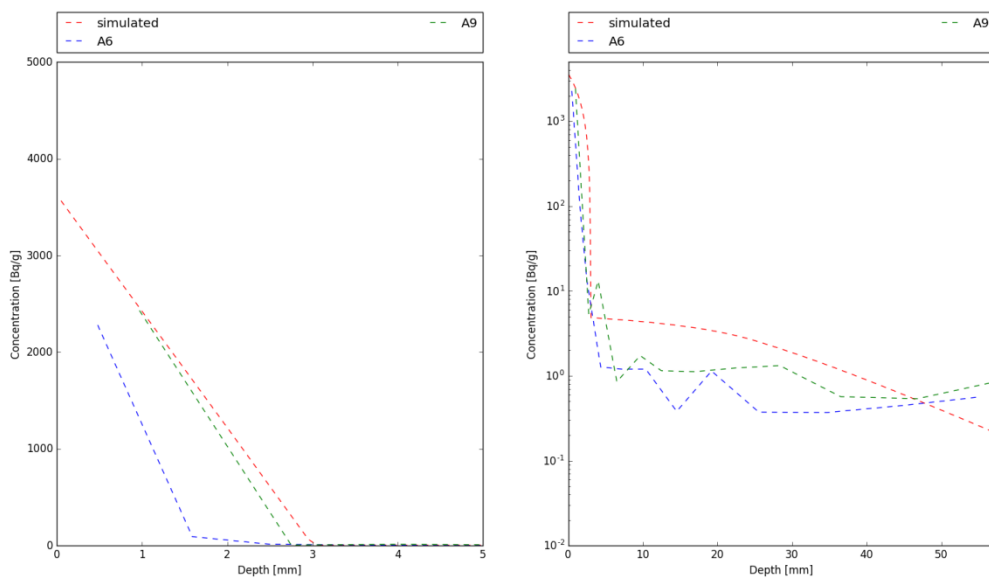
Stopovač	Difuzivita ve volné vodě [m ² /s]	Zdánlivá difuzivita [m ² /s] – maximum
Na-22	5e-10	7,21e-11
Cl-36	1,462e-9	3,13e-10
Co-57	2e-9	6,48e-12
Ni-63	5e-10	6,30e-11
Ba-133	2e-9	2,52e-10
Cs-137	2e-9	2,52e-10



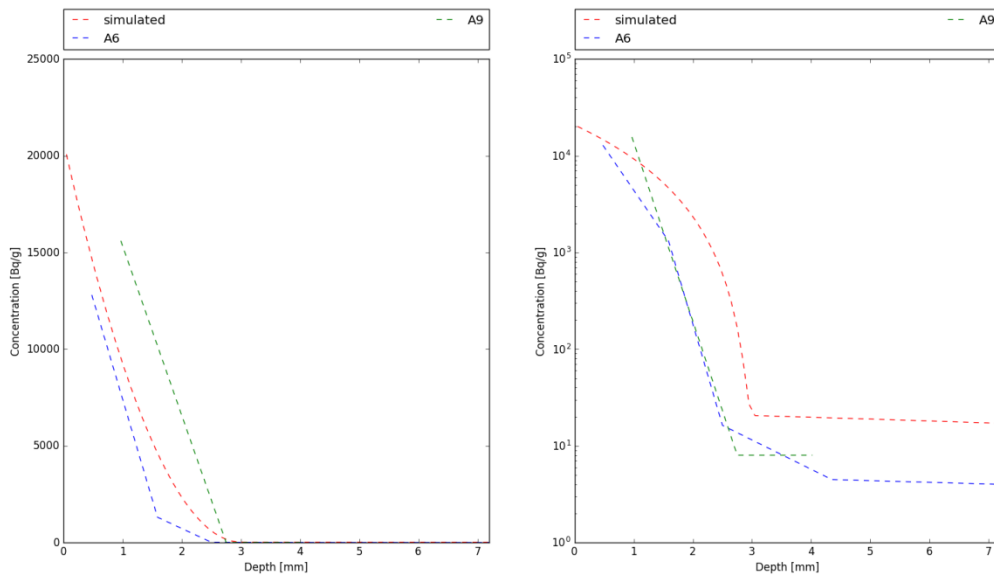
Obr. 24 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Na-22



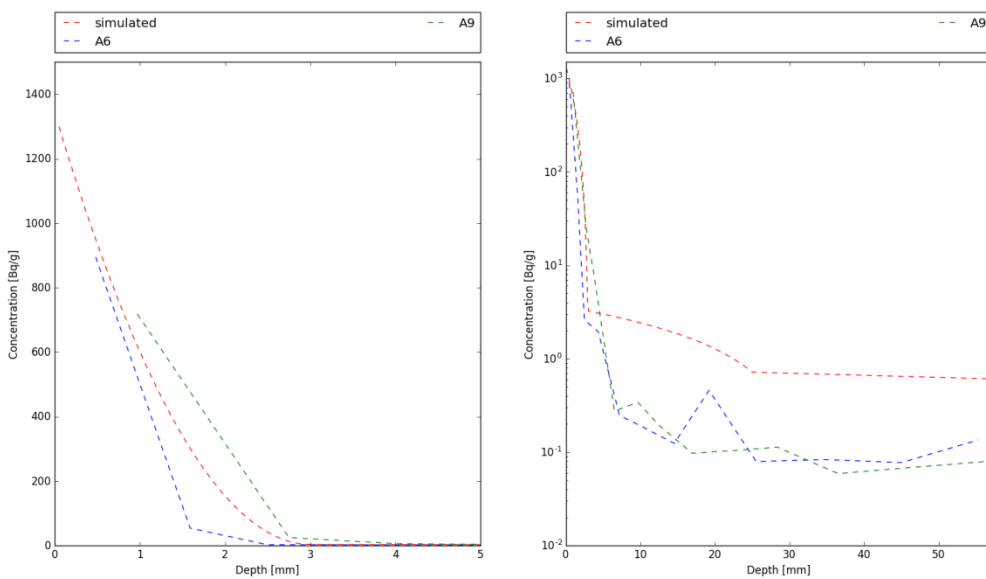
Obr. 25 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Cl-36



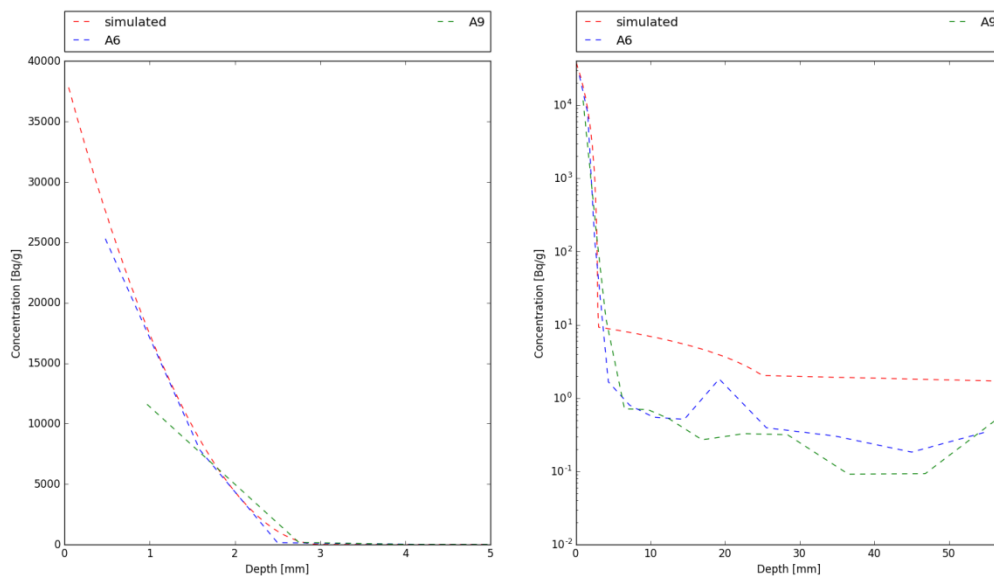
Obr. 26 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Co-57



Obr. 27 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ni-63



Obr. 28 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ba-133



Obr. 29 LTDE-SD – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Cs-137

3.2.1.2 Etapa_2

Druhá etapa modelování experimentu LTDE-SD spočívá v rozšíření modelu o simulaci vývoje koncentrace v roztoku stopovačů (radionuklidů). Tyto koncentrace jsou používány jako okrajové podmínky transportu na rozhraní roztok – hornina.

Model roztoku je nadřazen modelu Flow123D – zajišťuje jeho spouštění, modifikaci jeho vstupů a vyhodnocení jeho výstupů.

Počáteční stav roztoku byl odvozen z údajů uvedených v zadávací dokumentaci: počáteční objem roztoku je 1150 ml, počáteční koncentrace jednotlivých stopovačů byly spočteny na základě injektované aktivity.

Změny stavu roztoku byly způsobeny:

1. Odebíráním vzorků – ze zadávací dokumentace známy odebrané objemy spolu s časy, kdy k odběrům došlo. Nezpůsobují změnu koncentrace, ale změnu objemu roztoku spolu s hmotností stopovačů v roztoku rozpuštěných.
2. Hmotnostní tok do/z horninové matrice – počítán na základě výstupů (hmotnostní bilance) Flow123D.

Model roztoku sleduje čas, objem roztoku a hmotnosti stopovačů v něm rozpuštěných. Počítá okrajovou podmínku pro simulace transportu, které opakovaně spouští se simulační periodou 1 den (1 hodina během prvního dne). Po každém jednotlivém běhu transportního modelu, model roztoku vyhodnotí výstupy Flow123D (hmotnostní tok přes hranici reprezentující rozhraní roztok - hornina) a na jejich základě přepočte hmotnosti stopovačů v roztoku. Před každým během transportního modelu, model

roztoku zkontroluje, zda nedošlo k odběru vzorků. Pokud ano, náležitě upraví objem roztoku a hmotnosti stopovačů v něm rozpuštěných.

Vývoj koncentrace v roztoku je popsateľný diferenciální rovnicí prvního řádu. Model roztoku ji numericky řeší, ve své podstatě explicitní jednorokovou metodou. Simulační perioda dílčích transportních modelů je tak krokem časové diskretizace modelu roztoku, který má jednak vliv na přesnost numerického řešení a jednak je důležitý pro jeho stabilitu (Anderson, 1995).

Geometrie experimentu je komplikovaná, její reprezentace 3D výpočetní sítí byla obtížně použitelná kvůli vysokým nárokům na jemnost výpočetní sítě v blízkosti rozhraní roztok – hornina (vytvořená síť měla desítky miliónů elementů). Přistoupili jsme proto ke zjednodušení, které by mělo mít zanedbatelný (pokud vůbec jaký) dopad na přesnost výstupů (obzvláště v kontextu jiných nejistot s modelem spojených). Experiment byl reprezentován dvěma samostatnými geometriemi:

1. 1D geometrie – pro výpočet interakce mezi horninou a experimentální sekcí – puklina. Jak geometrie, tak výpočetní síť jsou identické s těmi použitými a popsány v Etapě_1. Plocha rozhraní roztok – hornina je $0,0236 \text{ m}^2$.
2. 2D geometrie - pro výpočet interakce mezi horninou a experimentální sekcí – vrt. Vytvořena jako výseč mezikruží (s úhlem výseče $\pi/90$ radiánů). Reprezentace celého mezikruží by zbytečně zvýšila výpočetní nároky. Plocha rozhraní roztok – hornina je $0,034/180 \text{ m}^2$ (při vyhodnocení výstupů Flow123D je hmotnostní tok násoben 180).

Kdykoli model roztoku volá Flow123D, spouští dvě jeho instance (jednou pro každou geometrii) a vyhodnotí výstupy obou.

Vyjma okrajové podmínky transportu jsou všechny parametry modelu shodné s Etapou_1 (včetně celkového časového rámce simulace).

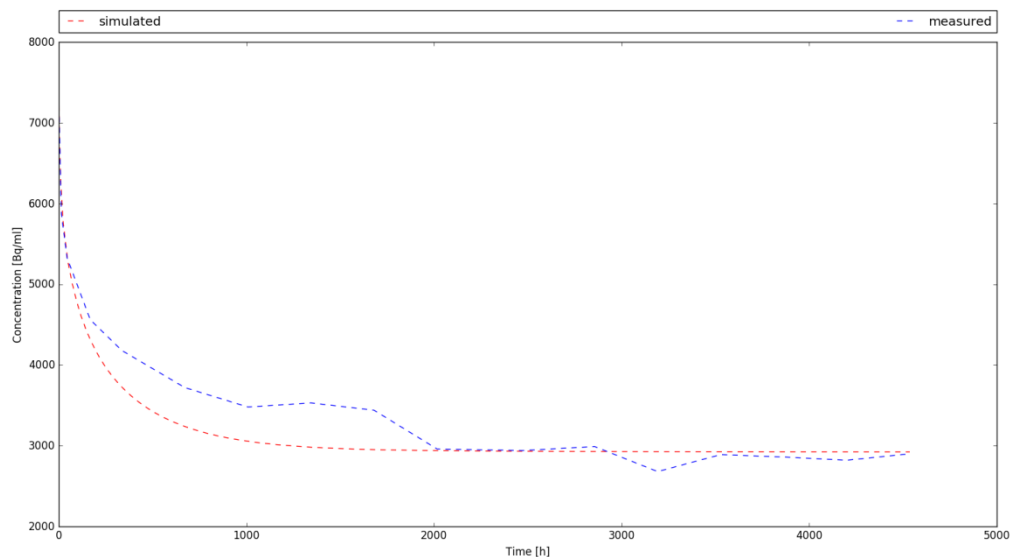
Níže jsou prezentovány vybrané výsledky simulací Etapy_2. Kompletní výsledky jsou spolu se stručným komentářem uvedeny v Příloze A.

Nejlepší shody s měřenými hodnotami koncentrace v roztoku bylo dosaženo pro Cs-137 (viz Obr. 30).

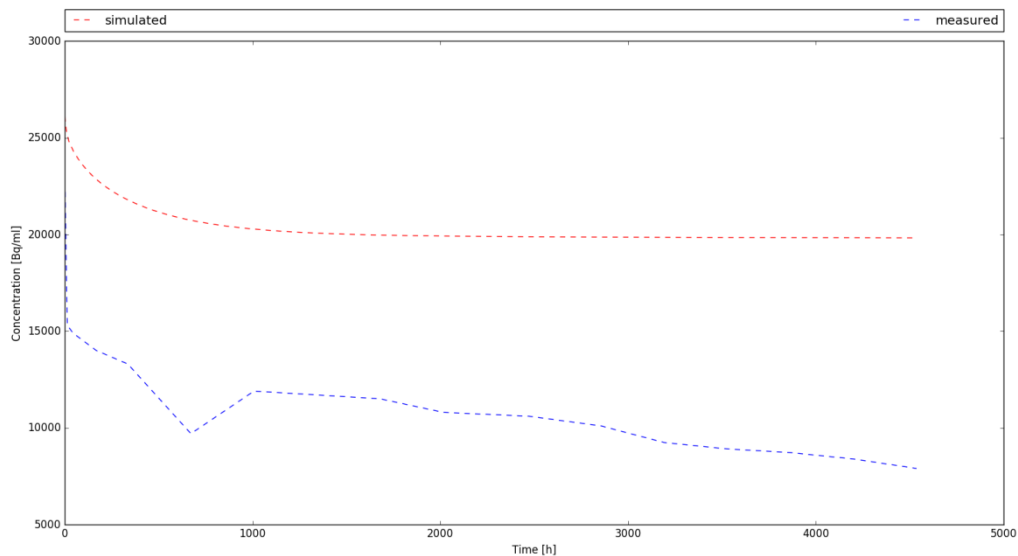
U ostatních stopovačů byla shoda horší, jak je ukázáno pro Ni-63 (Obr. 31). Z obrázku je patrný velmi rychlý pokles měřené koncentrace během prvních hodin experimentu. V důsledku rozdílné okrajové podmínky se přirozeně zhoršila také shoda simulovaného a měřených koncentračních profilů v hornině (viz Obr. 32, srovnej s Obr. 27). Kdybychom se snažili vylepšit shodu měřeného a simulovaného časového vývoje koncentrace v roztoku, museli bychom zvýšit celkovou hmotnost stopovače v horninové matici na přibližně dvojnásobek, což by shodu profilů v ní ještě výrazně

zhoršilo. Výsledek tak ukazuje nikoli na chybu v parametrech horninové matrice, ale na chybu hmotnostní bilance, která může být způsobena buď chybami měření aktivit ať už v roztoku (kde nejistoty měření jsou velmi dobře patrné z oscilací v některých časových řadách) nebo v matici nebo chybou experimentu, kdy některé stopovače se mohli vázat na experimentální vybavení.

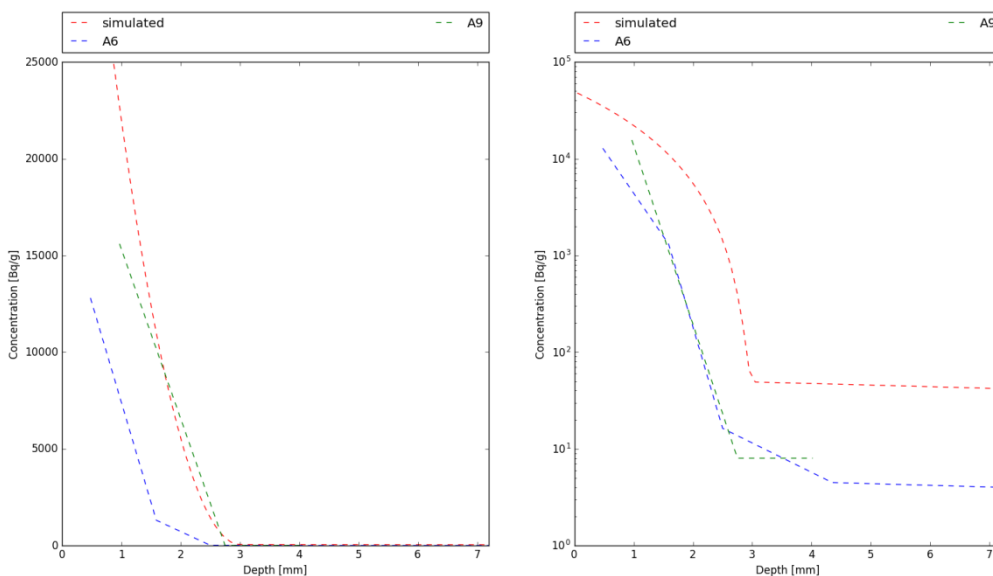
Dílčím závěrem budiž, že je lépe použít počáteční injektované množství stopovačů a simulovat koncentrační vývoj v roztoku (sledovat hmotnostní bilanci) než jako okrajovou podmínku používat chybou zatížená měření. Přestože simulované a měřené časové vývoje koncentrace stopovačů v roztoku nejsou shodné pro všechny stopovače, z toho plynoucí rozdíly v okrajové podmínce transportu na rozhraní roztok – hornina nezhoršují kvalitativní shodu koncentračních profilů v hornině, jakkoli shoda kvantitativní se může zhoršit. Právě kvalitativní shoda znamená, že validita předpokladu poklesu parametrů horniny s hloubkou zůstává, zlepšení shody kvantitativní může být dosaženo dodatečnou kalibrací parametrů.



Obr. 30 LTDE-SD – model roztoku – Cs-137



Obr. 31 LTDE-SD – model roztoku – Ni-63



Obr. 32 LTDE-SD – Etapa_2 – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmičké (vpravo) škále – Ni-63

3.2.2 Závěry pro simulaci transportních procesů v geosféře

Ze simulací LTDE-SD experimentu plynou závěry pro simulaci transportních procesů v geosféře následující závěry:

- V blízkosti vrtů a rozrážek je třeba počítat s přítomností zóny narušení (EDZ, BDZ), jejíž mocnost a vlastnosti pochopitelně závisí na zvolené metodě těžby/vrtání. Parametry zóny narušení mohou být velmi odlišné od parametrů neovlivněné horniny. Konkrétně lze v zóně narušení očekávat vyšší porozitu a s ní spojenou nižší míru sorpce.

- In-situ experimenty jsou důležité. Experimenty laboratorní vždy probíhají na vzorcích, které byly ovlivněny. Inverzní modely in-situ experimentů mohou poskytnout parametry postihující transportní procesy v rostlém masívu.
- Míra sorpce v neporušené a neovlivněné hornině může být až o několik řádů nižší, než odpovídá parametrům zjištěným v laboratoři.
- V případě DFN modelů je difúze společně se sorpcí významným procesem způsobujícím retardaci stopovače, což je významné například tehdy, slouží-li geosféra jako bariéra bránící pronikání stopovače do biosféry. Přesnost popisu těchto procesů tak, aby byla postižena realita, je stále předmětem diskuze. Každý realizovaný experiment a každý jeho inverzní i prediktivní model přispívají k upřesnění našich představ o tom, jak stopovače migrují a jaké hodnoty parametrů tuto migraci nejlépe postihují.

Výsledky simulací a z nich plynoucí závěry budou publikovány v souhrnné zprávě SKB, která se v současnosti připravuje a již bude autor této disertační práce spoluautorem.

4 Generování transportních cest v úloze transportu rozpukaným porézním médiem

V této části disertační práce bude diskutována problematika určení transportní cesty v úloze transportu rozpukaným porézním médiem. Začneme popisem, co je to transportní cesta a jak se v současnosti standardně hledá. Navážeme zdůvodněním, proč je standardní metoda pro mnou řešené úlohy nevhodná. Pokračovat budeme návrhem vlastních metod a kapitolu zakončíme demonstrací jejich funkčnosti na testovacích úlohách.

4.1 Transportní cesty a metoda particle tracking

Transportní cesty jsou chápány jako posloupnost bodů v prostoru (elementů výpočetní sítě) definující cestu v určitém smyslu dominantního šíření transportované látky ze zdroje na hranici oblasti. Dominantnost transportní cesty lze vykládat dvěma základními způsoby:

- nejrychlejší cesta – posloupnost elementů (bodů v prostoru), kterými se transportovaná látka dostane ze zdroje na povrch v nejkratším čase,
- nejvydatnější cesta – posloupnost elementů (bodů v prostoru), kterými je v daném čase transportováno největší množství látky.

V této práci je řešena problematika hledání transportních cest v úloze transportu rozpukaným porézním médiem. Existují tři základní varianty konceptualizace modelu rozpukaného média (Singhal a Gupta, 2010):

1. ekvivalentní kontinuum (EPM),
2. diskrétní puklinová síť (DFN),
3. kombinace EPM a DFN.

Kombinace přístupů ve variantě 3 implikuje výskyt elementů různých dimenzí ve výpočetní síti (elementy reprezentující DFN jsou nižší dimenze než okolní elementy reprezentující EPM).

Simulována je úloha proudění podzemní vody a transportu látek v ní rozpuštěných. Úloha je řešena na oblasti Ω reprezentující spojitou aproximaci porézního a rozpukaného média. Výpočetní síť je získána diskretizací oblasti pomocí simplexových elementů různé dimenze (linie, trojúhelníky a čtyřstěny). Na této síti je následně řešena úloha proudění podzemní vody, která je popsána Darcyho rovnicí a rovnicí kontinuity. Tato úloha může být krom jiných metod řešena primární (PFEM) nebo smíšenou hybridní metodou konečných prvků (MHFEM) (Brezzi a Fortin, 2012; Roberts a Thomas, 1991). Principiálními neznámými tohoto systému jsou tlaková výška a darcyovský tok buď ve vrcholech elementů (PFEM), nebo v jejich těžištích (MHFEM). Transport rozpuštěných látek je popsán advektivně-difuzní rovnicí. Úloha transportu

může být řešena řadou způsobů, konkrétně ve Flow123D buď pomocí metody štěpení operátoru (TOS) (Ferziger a Perič, 2002), která reprezentuje konečně-objemový řešič explicitní v čase, nebo nespojitou Galerkinovou metodou (DG) (Ferziger a Perič, 2002), která je implicitní v čase. Principiální proměnou úlohy transportu je koncentrace látky vystupovaná buď ve vrcholech elementů (DG), nebo v jejich těžištích (TOS).

Pro úlohu nalezení transportní cesty je tedy k dispozici výpočetní síť, pole rychlostí a koncentrací na jejích elementech (nebo v jejích uzlech) v jednotlivých časech simulace a počáteční bod představující zdroj.

Běžně používanou metodou pro určení transportních cest je particle tracking. Její různé implementace lze dohledat v existující literatuře (Ahrens et al., 2005; Ayachit a Utkarsh, 2015; Clement, 1997; Konikow et al., 1996; Pollock, 2016; Zheng et al., 2012). Metoda využívá spočtené rychlostní pole pro výpočet proudnic částic transportovaných čistě advekcí. Uvažujeme-li kapalinu o konstantní hustotě, jsou tyto proudnice dány rovnicí:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{v}(\vec{p}, t), \quad (22)$$

$$\vec{p} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}, \quad (23)$$

$$\vec{v} = v_x\vec{i} + v_y\vec{j} + v_z\vec{k}, \quad (24)$$

kde \vec{p} je polohový vektor a \vec{v} je vektor rychlosti (\vec{i} , \vec{j} a \vec{k} jsou bázové vektory). Řešením této rovnice pro pozici částice v čase t je:

$$\vec{p}(t) = \vec{p}(t_0) + \int_{t_0}^t \vec{v}(\vec{p}, t) dt, \quad (25)$$

kde $\vec{p}(t_0)$ je počáteční poloha částice v čase t_0 .

Řešení rovnice pro $\vec{p}(t)$ vyžaduje znalost rychlostního pole v libovolném bodu časoprostoru modelové domény. Máme-li k dispozici znalost přesného (analytického) řešení rychlostního pole, může i rovnici pro $\vec{p}(t)$ řešit analyticky. Tak tomu nicméně typicky není. Rychlostní pole jakožto výstup numerické metody přirozeně nemůže být spojitě (rychlosti jsou v závislosti na zvolené numerické metodě počítány buď ve vrcholech elementů, nebo v jejich těžištích), pro znalost rychlostního pole v libovolném bodě časoprostoru je proto nevyhnutelné použití některé z interpolačních metod. I rovnici pro $\vec{p}(t)$ je pak třeba řešit numericky například Eulerovou metodou nebo lépe přesnější metodou Runge-Kutta (Anderson, 1995).

Právě z nutnosti interpolovat rychlostní pole v prostoru (a případně také v čase pro nestacionární proudění) plyne hlavní nevýhoda metody particle tracking. Bude-li mým cílem určení transportní cesty v modelu kombinujícím EPM a DFN přístup (tedy

s výpočetní sítí zahrnující elementy různých dimenzí), ukáže se metoda particle tracking být krajně nevhodnou, jelikož její pomocí vygenerované transportní cesty budou puklinové zóny tvořené elementy nižší dimenze typicky jen více či méně blízce kopírovat nikdy s nimi však nesplynou tak, jak by tomu bylo v případě, kdyby dimenze elementů puklinové sítě byla shodná s dimenzí elementů ekvivalentního kontinua. Tyto obtíže jsou dokumentovány například ve Willmann et al. (2013), kde je navrženo rovněž řešení, které je nicméně aplikovatelné jen na pravidelné ortogonální sítě.

4.2 Alternativní metody hledání transportní cesty

V kontextu výše uvedených nedostatků metody particle tracking pro kombinované EPM/DFN modely jsou v této práci navrženy dvě alternativní metody pro hledání transportní cesty.

Naším cílem je vygenerovat posloupnost elementů výpočetní sítě reprezentující v nějakém smyslu dominantní transportní cestu (v daném čase) a tuto cestu následně popsat (její délkou a dobou zdržení).

První z přístupů, který bude v této práci označován jako dynamický, využívá opakovaného spouštění modelu pro simulaci transportu s krátkým časovým krokem a následného vyhodnocování koncentrací v okolí zdrojového elementu (ten se mění s každým spuštěním).

Druhý z přístupů, který bude v této práci označován jako statický, je založen na výpočtu a vyhodnocení funkcionálu rychlosti a koncentrace pro jednotlivé elementy výpočetní sítě.

Statický přístup spolu s ověřením na testovacích úlohách byl publikován v odborném časopise (Říha a Královcová, 2017).

4.2.1 Dynamický přístup

Tento přístup vychází z chápání transportní cesty jako posloupnosti takových elementů, kterými se šíří nejvíce transportované látky. Pro její generování využívá opakovaný výpočet transportu s krátkým časem simulace.

Vstupem pro metodu je výpočetní síť, šablona vstupního souboru pro Flow123D (CON nebo YAML), identifikace počátku transportní cesty (jako souřadnice v prostoru nebo jako číslo elementu) a čas simulace.

Transportní cesta je generována jako posloupnost elementů ze zdroje na hranici oblasti v několika krocích (Obr. 33):

1. Stanovení počátku transportní cesty jako ID elementu. Je-li počátek dán kartézskými souřadnicemi bodu, je ID elementu nejprve třeba zjistit (realizováno vlastním skriptem).

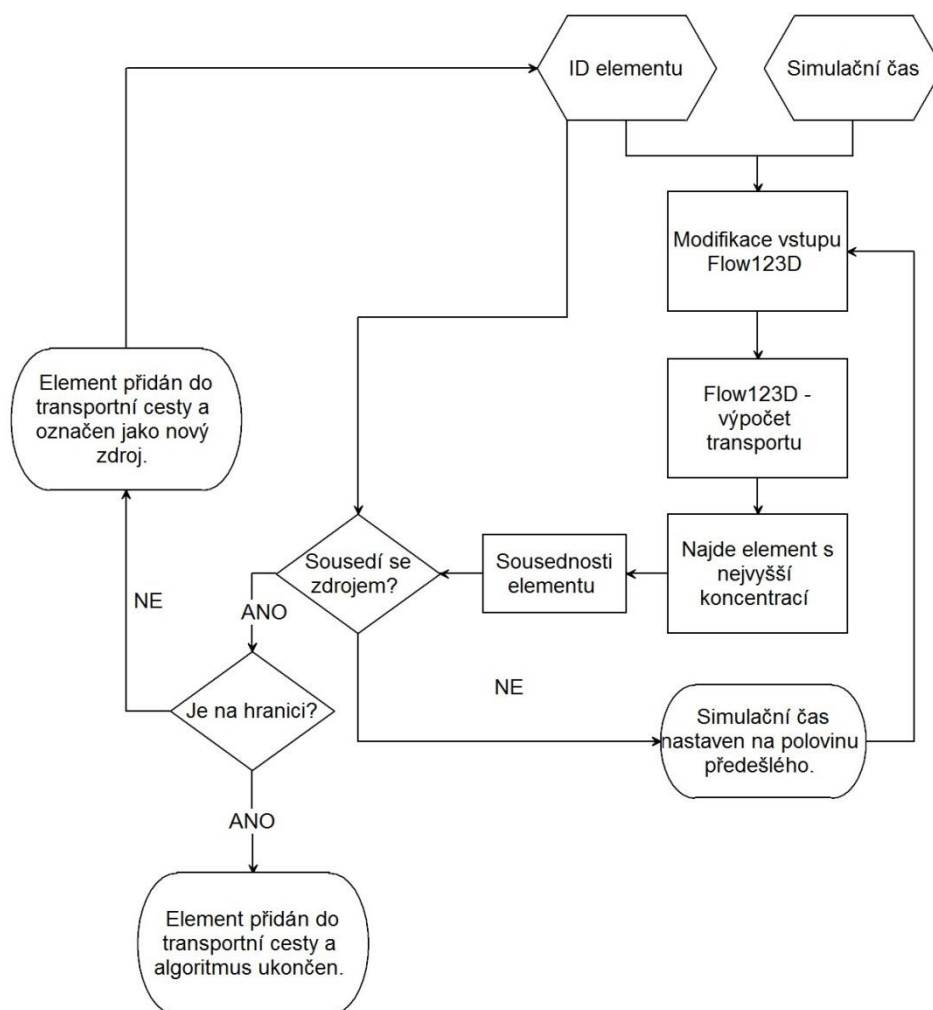
2. Aktuálně poslední element transportní cesty je označen jako zdrojový. Pomocí jeho ID je upraven vstupní soubor pro Flow123D (jeho předpřipravená šablona) tak, že na zdrojovém elementu je předepsána počáteční koncentrace (libovolná hodnota větší než nula).
3. Ve Flow123D proběhne výpočet transportu s časem simulace τ (a výpočetním krokem $\tau/10$).
4. Je nalezen element s nejvyšší koncentrací (vyjma elementu zdrojového) a spočteny jeho sousednosti.
5. Sousedí-li tento element s elementem zdrojovým, je přidán do transportní cesty. Je-li zároveň na hranici oblasti (počet jeho sousedů je nižší než počet jeho „hran“), je algoritmus ukončen a transportní cesta vizualizována. V opačném případě se algoritmus vrací do bodu 2. Nesousedí-li tento element s elementem zdrojovým, vrací se algoritmus do bodu 3 s tím, že τ je nyní rovno polovině své předešlé hodnoty.

Výše popsáný postup byl implementován v jazyce Python (ve verzi 3.5.0).

Výhodou metody je, že simulován může být jak čistě advektivní transport, tak i transport zahrnující další procesy (např. molekulární difuzi nebo sorpci), že tedy může být zohledněn případný vliv retardačních procesů na transportní cestu a její parametry. Metoda je také velmi robustní, spolehlivě použitelná i pro výpočetní sítě kombinující elementy různých dimenzí.

Nevýhodou je výpočetní náročnost, kdy každý element transportní cesty znamená jedno spuštění Flow123D s tím, že vedle jednoho kroku transportu musí být vždy spočteno i proudění (vlastnost Flow123D). Tato nevýhoda je obzvláště citelná při výpočtech na velkých výpočetních sítích reálných lokalit, kde by nalezení transportní cesty tímto způsobem trvalo řádově minimálně desítky hodin.

Dále je třeba podotknout, že výsledná transportní cesta se může lišit v závislosti na volbě parametru τ , jak bude demonstrováno v kapitole 4.4.2.1.



Obr. 33 Dynamický přístup hledání transportní cesty - algoritmus

4.2.2 Statický přístup

Statický přístup hledání transportní cesty je založen na výpočtu a vyhodnocení funkcionálu rychlosti a koncentrace pro jednotlivé elementy výpočetní sítě. Funkcionál je dán předpisem:

$$f(c, v) = \omega_c \left(\frac{c}{c_{max}} \right) + \omega_v \left(\frac{|v|}{|v|_{max}} \right), \quad (26)$$

kde c [kg/m^3] je koncentrace na daném elementu, c_{max} [kg/m^3] je nejvyšší koncentrace vyskytující se v simulované oblasti, v [m/s] je skutečná rychlost proudění na daném elementu a v_{max} [m/s] je nejvyšší skutečná rychlost proudění vyskytující se v simulované oblasti. Skutečnou rychlost dostaneme z darcyovské rychlosti jejím vydělením porozitou. Váhové konstanty ω_c a ω_v [-] jsou v rovnici zavedeny pro větší flexibilitu jejího využití. Správná volba váhových konstant totiž umožňuje akcentovat některou z možností chápání definice dominantní transportní cesty (nejrychlejší, nejvydatnější).

To, která z výše uvedených transportních cest, je tou, kterou hledáme, závisí na konkrétní aplikaci. Sledujeme-li například postup nějaké nežádoucí látky ze zdroje (stará ekologická zátěž, hlubinné úložiště radioaktivních odpadů, ...) na povrch, může nás zajímat jak místo na povrchu, kde se látka objeví nejdříve (ať už v jakékoli koncentraci), a doba, za kterou se tam objevila, tak i část povrchu, kde se látka vyskytne nejvíce. Oba dva tyto aspekty mohou splynout, je-li nejrychlejší cesta zároveň tou nejvydatnější. Výsledné cesty se ale také mohou výrazně lišit v případě, že nejrychlejší cestou postupuje vlivem výrazného ředění jen velmi malá koncentrace.

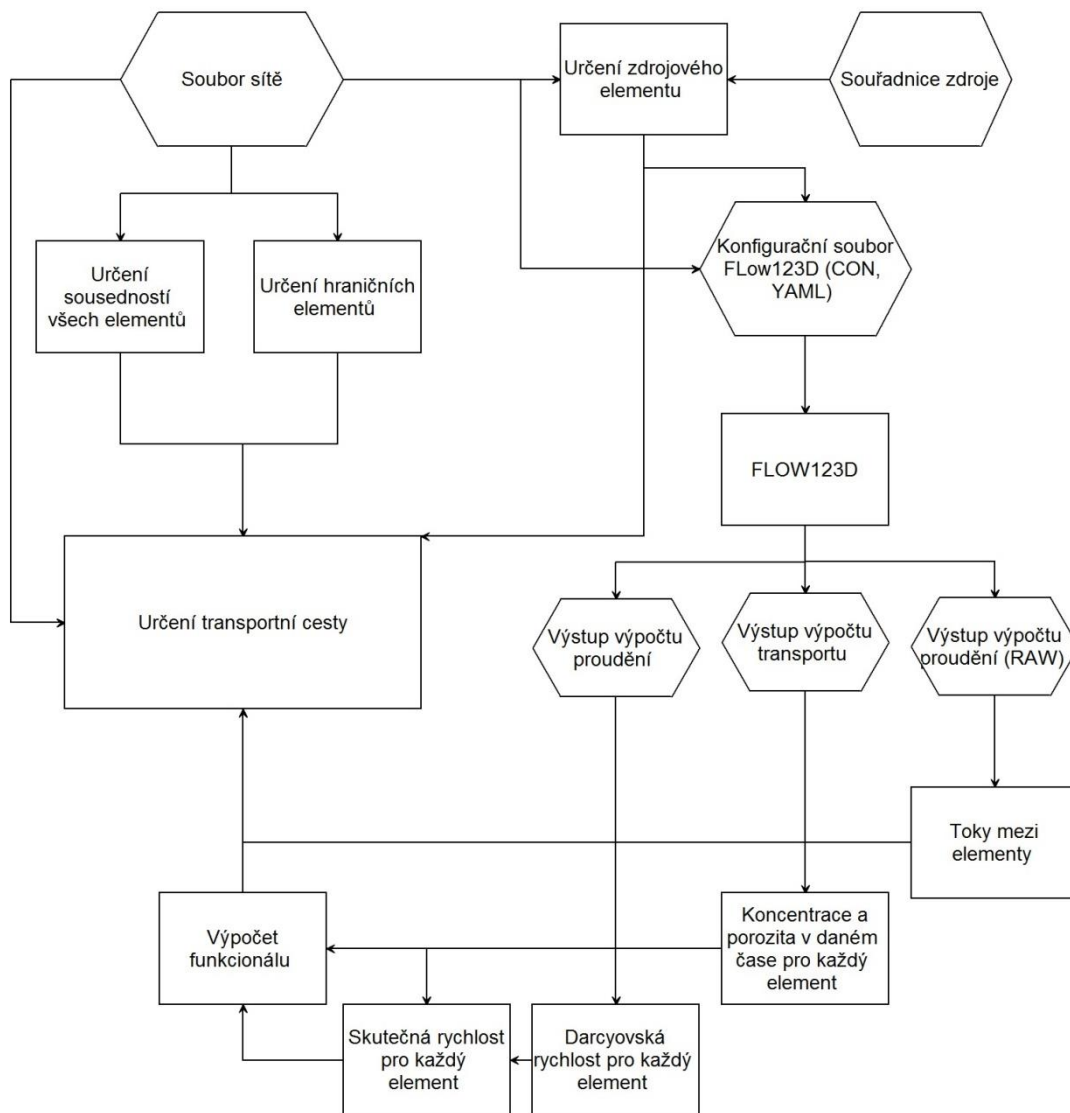
Transportní cesta je na základě vypočteného funkcionálu (rovnice 26) postupně generována jako posloupnost elementů ze zdroje na hranici oblasti v několika krocích (Obr. 34, Obr. 35):

1. Element reprezentující zdroj je stanoven jako počátek transportní cesty.
2. Jsou nalezeny všechny jeho sousední elementy a spočten funkcionál v nich.
3. Mezi sousedy je nalezen element s nejvyšší hodnotou funkcionálu.
4. Je ověřeno, že z aktuálně posledního elementu transportní cesty je do takto nalezeného elementu kladný tok (aby se zabránilo cyklení):
 - a. Pokud ano, je element přidán do transportní cesty. Je-li element zároveň hraniční, je algoritmus ukončen. Pokud ne, algoritmus se vrátí do bodu 2.
 - b. Pokud ne, algoritmus se vrátí do bodu 3 s tím, že element je z množiny sousedností vyřazen.

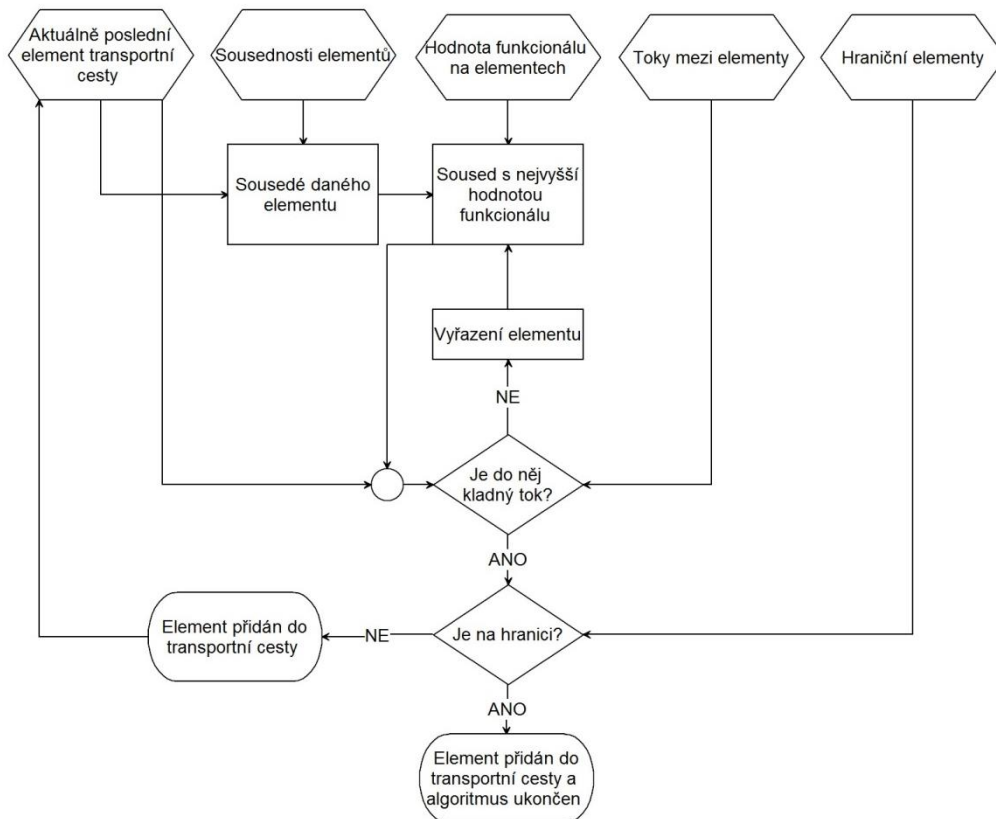
Bod tři lze alternativně rozšířit o bezrozměrný parametr $p \in (0; 1]$, který zajišťuje, že vygenerovaná transportní cesta je co pokud možno nepřímější. Funguje to tak, že nejvyšší hodnota funkcionálu nalezená mezi sousedy posledního elementu transportní cesty označíme jako f_{max} . Následně ze všech sousedů vybereme ty, v nichž hodnota funkcionálu je větší než $f_{max} \cdot p$ a označíme je jako kandidáty transportní cesty. Z těchto kandidátů na základě výsledků proudění vybereme ten, do kterého je z posledního elementu transportní cesty největší tok, a předáme ho do bodu 4a. Parametr je užitečný například tehdy, je-li $\omega_v = 0$ (funkcionál počítán jen na základě koncentrace). Pak v oblasti, kde je na všech elementech podobná koncentrace, pomáhá použití tohoto parametru přeci jen zohlednit alespoň směr proudění (když už ne jeho rychlost) a udržet generovanou transportní cestu v přímém směru. Parametr je obvykle vhodné volit blízký jedné. Funkce parametru p bude demonstrována v kapitole 4.4.2.2.

Výše popsaný postup byl implementován v jazyce Python (ve verzi 3.5.0).

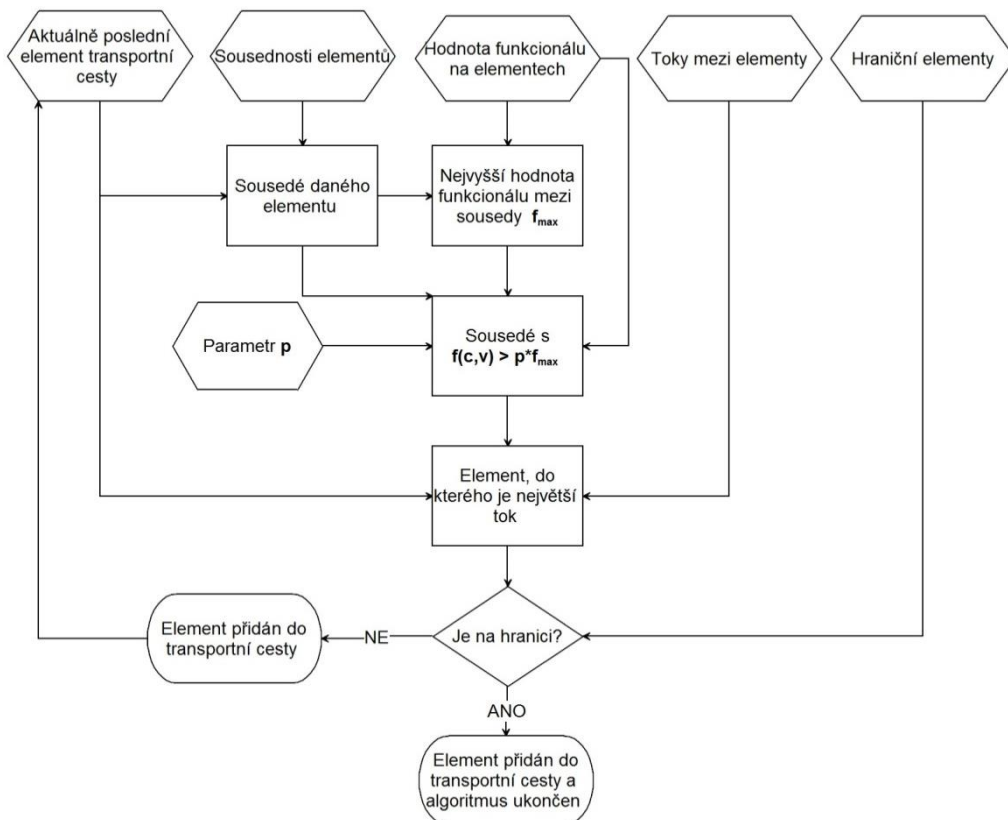
Koncentrace jsou do funkcionálu dosazovány na základě výsledků simulace transportu, vygenerovaná transportní cesta se proto může měnit v čase.



Obr. 34 Statický přístup hledání transportní cesty – východiska algoritmu



Obr. 35 Statický přístup hledání transportní cesty – jádro algoritmu



Obr. 36 Statický přístup hledání transportní cesty – jádro algoritmu – verze 2

4.3 Parametry transportní cesty

Transportní cesta nalezená jedním z výše uvedených přístupů je popsána posloupností elementů ze zdroje na hranici výpočetní oblasti. Tím máme dán její směr a místo jejího vyústění. Ke kvantitativnímu popisu transportní cesty pak mohou sloužit její délka a doba zdržení v ní.

Délka transportní cesty je počítána jako suma délek spojnic středů hran (či stěn) l_i [m], přes které sousedí po sobě jdoucí elementy transportní cesty:

$$L = \sum_{i=0}^{n-2} l_i = \sum_{i=0}^{n-2} \sqrt{(x_{i+1} - x_i)^2 + (y_{i+1} - y_i)^2 + (z_{i+1} - z_i)^2}, \quad (27)$$

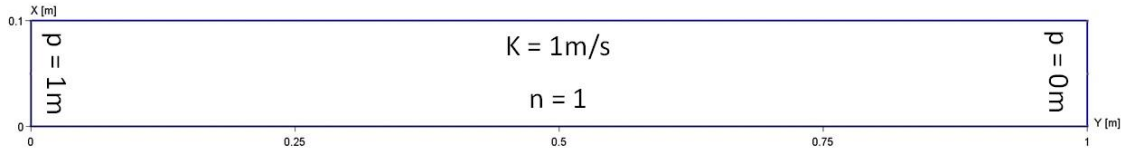
kde n je počet elementů transportní cesty a $[x_i; y_i; z_i]$ jsou souřadnice středu výstupní hrany (stěny) i -tého elementu cesty. Výstupní hrana posledního elementu, který musí být na hranici oblasti (to plyne z principu fungování výše popsaných algoritmů), je taková jeho hrana, přes kterou element nemá žádnou sousednost. Chceme-li, aby transportní cesta nezačínala na výstupní hraně zdrojového elementu ale v jeho těžišti, je třeba délku transportní cesty navýšit o délku spojnice řečeného těžiště a bodu $[x_0; y_0; z_0]$.

Známe-li nyní délky jednotlivých úseků transportní cesty, můžeme jejich pomocí spočítat také dobu zdržení T [s], tedy čas, za který by myšlená částice prošla oblastí ze zdroje až na povrch po nalezené transportní cestě:

$$T = \sum_{i=0}^{n-2} t_{i+1} = \sum_{i=0}^{n-2} \frac{l_i \cdot n_{i+1}}{v_{i+1}}, \quad (28)$$

kde v_i [m/s] je darcyovská rychlost na i -tém elementu a n_i [-] je porozita na i -tém elementu, která je ve vztahu za účelem přepočtu darcyovské rychlosti na skutečnou. Byla-li při výpočtu délky cesty provedena korekce do těžiště zdrojového elementu, je třeba patřičně dopočítat také dobu zdržení.

Jelikož jsou transportní cesty generovány v diskrétním prostoru jako posloupnost elementů, jsou typicky o něco delší než by byly, pokud by byly vygenerovány v prostoru spojitém. S tím pochopitelně souvisí i o něco větší doba zdržení. Míra těchto rozdílů, která závisí na kroku diskretizace sítě a její struktuře, byla testována na úloze znázorněné na Obr. 37. Úloha byla navržena tak, aby transportní cesta z libovolného bodu vedla přímo ve směru osy y a aby doba zdržení byla číselně rovna délce transportní cesty (na celé oblasti je konstantní rychlost 1 m/s).

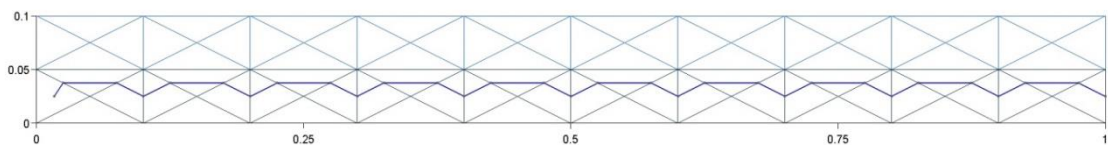


Obr. 37 Úloha pro testování výpočtu délky transportní cesty a doby zdržení (p je tlaková výška)

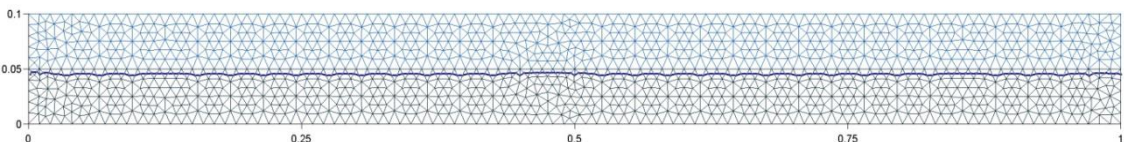
Oblast byla diskretizována pomocí trojúhelníkových elementů s různými kroky (viz Tab. 13). Pro každou diskretizaci byla nalezena transportní cesta (statickým přístupem s implementovaným parametrem pro napřímení cesty $p = 0,8$) a následně spočtena její délka a doba zdržení. Zdrojový element byl vždy ten, ve kterém leží bod $[0,05; 0; 0]$. Transportní cesta začíná až v jeho těžišti, proto se její přesná délka nikdy nerovná jedné. Nalezené transportní cesty pro vybrané kroky diskretizace jsou znázorněny na Obr. 38, Obr. 39 a Obr. 40.

V Tab. 13 jsou pro jednotlivé kroky diskretizace uvedeny počty elementů výpočetní sítě, přesné délky transportní cesty (spojité v prostoru), spočtené délky transportní cesty a jejich relativní chyby. Vzhledem k charakteru úlohy není třeba uvádět také doby zdržení, tabulka by totiž vypadala totožně. Z tabulky lze vyčíst, že klesající krok diskretizace do určité míry znamená také klesající relativní chybu spočtené délky transportní cesty. Znamená ale také klesající míru uspořádanosti elementů v síti (to se může lišit v závislosti na software použitém pro její generování, v našem případě GMSH (Geuzaine a Remacle, 2009), což na přesnost výpočtu délky transportní cesty působí naopak nepříznivě (viz Obr. 40).

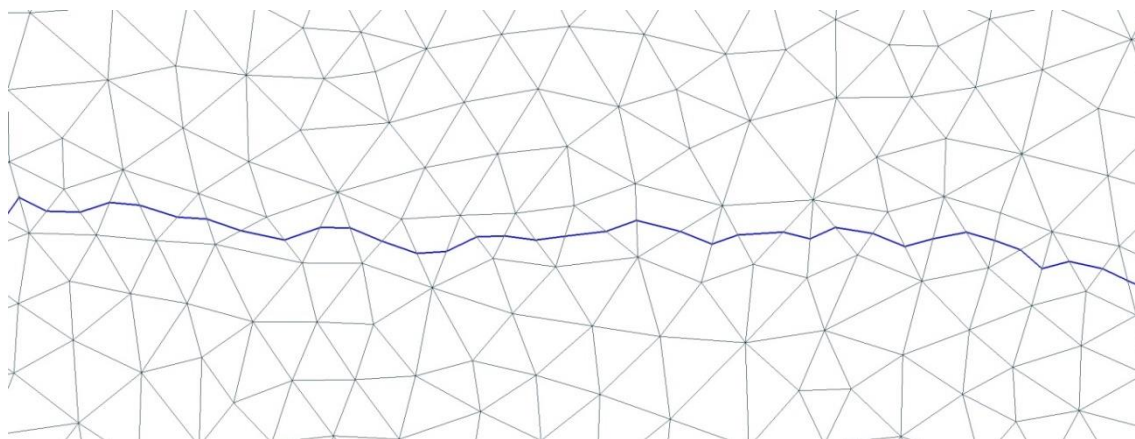
Celkově lze říci, že při správné volbě kroku diskretizace výpočetní síť je chyba kvantitativního popisu transportní cesty způsobená jejím diskrétním charakterem přiměřeně malá a nikterak neomezuje použitelnost výše popsanych metod.



Obr. 38 Transportní cesta pro krok diskretizace 0,1 m



Obr. 39 Transportní cesta pro krok diskretizace 0,01 m



Obr. 40 Transportní cesta pro krok diskretizace 0,001 m – přibližný výřez

Tab. 13 Závislost relativní chyby délky transportní cesty na diskretizaci

krok diskretizace [m]	počet 2D elementů	přesná délka [m]	spočtená délka [m]	délka - relativní chyba [%]
0,1	80	0,9833	1,0461	6,38
0,01	2442	0,9981	1,0158	1,77
0,005	10486	0,9988	1,0274	2,87
0,0025	41638	0,9994	1,0286	2,92
0,001	262988	0,9998	1,0481	4,83

4.4 Testovací úlohy

V této kapitole budou představeny tři testovací úlohy navržené pro ověření funkčnosti a použitelnosti statického a dynamického přístupu pro hledání transportní cesty. Každá z představených úloh má emulovat nějakou „reálnou“ situaci. První úloha představuje blok horniny s méně vodivými oblastmi (EPM koncept), druhá úloha blok horniny s vodivějšími zónami nižší dimenze (EPM/DFN koncept) a třetí úloha totéž s realističtějším charakterem proudového pole určeným průběhem reliéfu.

4.4.1 První testovací úloha

Jedná se o 2D úlohu, která měla za cíl ověřit funkčnost statického a dynamického přístupu pro hledání transportní cesty srovnáním jejich výstupů s výsledky metody particle tracking. Úloha je diskretizována výhradně 2D (trojúhelníkovými) elementy, je proto na místě očekávat, že metoda particle tracking bude fungovat správně (v mezích chyb způsobených krokem prostorové i časové diskretizace).

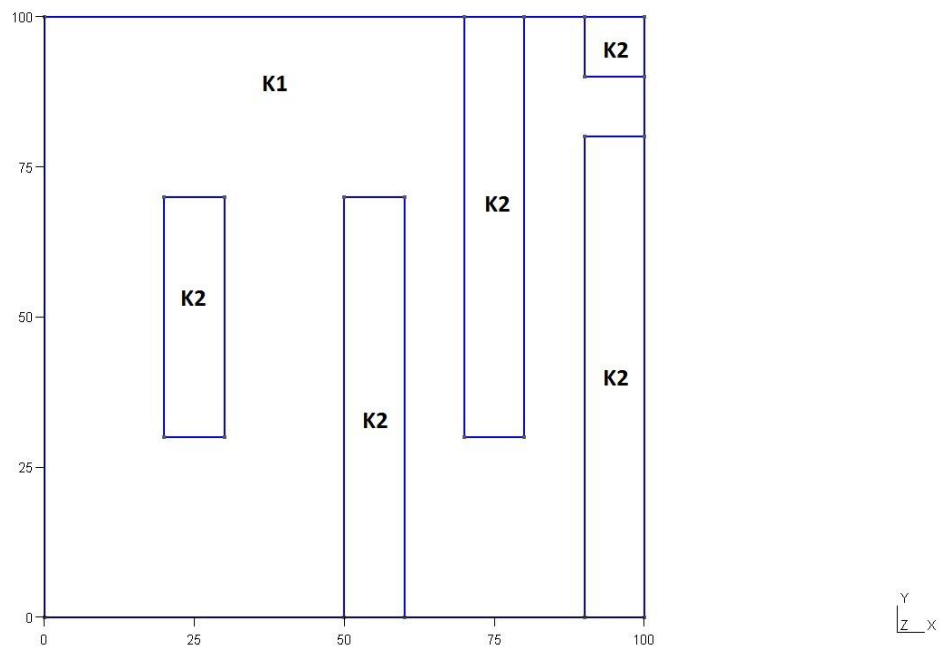
Geometrie úlohy je znázorněna na Obr. 41 (v rovině xy, v metrech). Podoblasti označené K2 mají hydraulickou vodivost $1 \cdot 10^{-2} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. Podoblast označená K1 má hydraulickou vodivost o dva řády vyšší, tj. 1 m/s. Porozita oblasti je konstantní v celé ploše (= 0,1).

Okrajové podmínky jsou předepsány následovně:

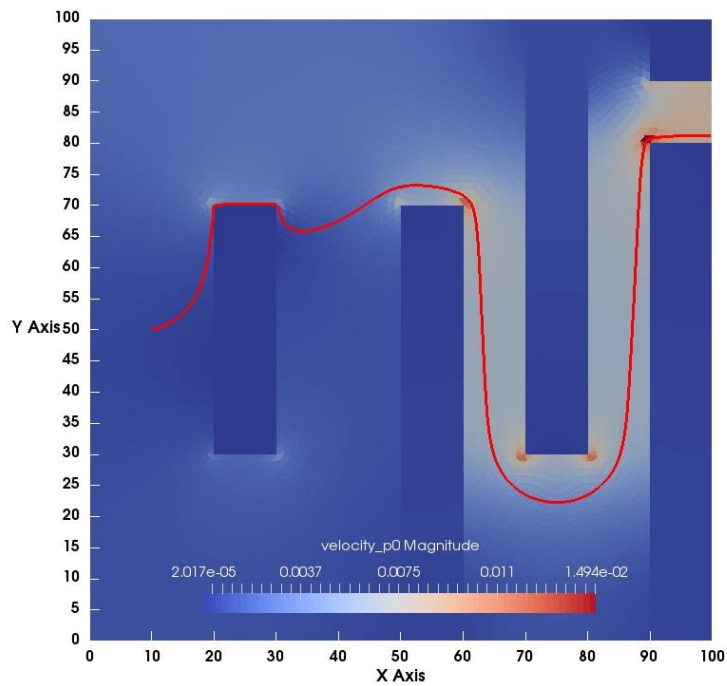
- Na hranici $x = 0$ Dirichletova okrajová podmínka konstantní tlakové výšky 1 m.
- Na hranici $x = 100$ Dirichletova okrajová podmínka konstantní tlakové výšky 0 m.
- Na zbylých hranicích ($y = 0$ a $y = 100$) homogenní Neumannova okrajová podmínka („no flow“).

Uvažovaná počáteční poloha částice je v bodě [10; 50].

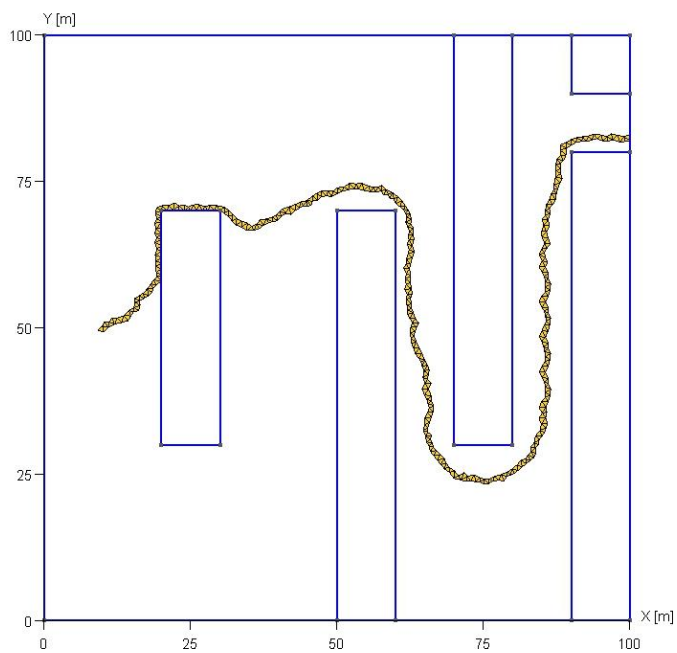
Úloha byla diskretizována trojúhelníkovými elementy. Těch je 26 194.



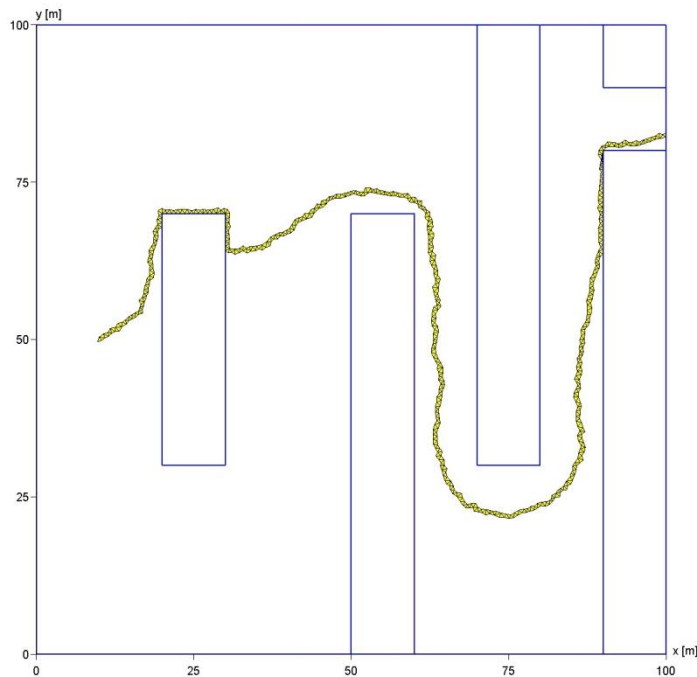
Obr. 41 První testovací úloha – geometrie



Obr. 42 První testovací úloha – výsledky particle tracking (jako podklad použity absolutní hodnoty darcyovské rychlosti [m/s])



Obr. 43 První testovací úloha – výsledky dynamického přístupu generování transportní cesty ($\tau = 100$ s)



Obr. 44 První testovací úloha – výsledky statického přístupu generování transportní cesty ($\omega_v = 1$; $\omega_c = 2$; $p = 0,9$)

Na Obr. 42 je znázorněn výsledek metody particle tracking. Ten byl získán užitím filtru stream tracer v programu ParaView (Ahrens et al., 2005; Ayachit a Utkarsh, 2015). Na Obr. 43 je znázorněn výsledek dynamického přístupu ($\tau = 100$ s) pro hledání transportní cesty a na Obr. 44 výsledek přístupu statického ($\omega_v = 1$; $\omega_c = 2$; $p = 0,9$). Srovnáme-li tyto výstupy s výstupem metody particle tracking, vidíme, že průběh všech vygenerovaných transportních cest je podobný.

Na vygenerovanou transportní cestu má vliv diskretizace a to nejen její charakteristická délka (míra „jemnosti“), ale také její struktura - průběh rozhraní fyzických skupin je v diskretizaci zachován. To do jisté míry předurčuje, jakým směrem může vznikající transportní cesta postupovat. Například pro trojúhelníkový element, je-li jedna jeho stěna součástí rozhraní dvou fyzických skupin s výrazně odlišnými hydraulickými vlastnostmi a nelze tak předpokládat, že by přes ni transportní cesta přecházela, pak ze zbývajících dvou hran je jedna nutně „vtoková“ a druhá „výtoková“. Je-li toto rozhraní přibližně ve směru rychlostního pole, pak ho transportní cesta bude vlivem diskretizace kopírovat déle, než by odpovídalo spojitě realitě.

V Tab. 14 je uvedeno kvantitativní srovnání získaných transportních cest z pohledu jejich délky a doby zdržení myšlené částice. Oba dva navržené přístupy fungující v diskrétním prostoru generují transportní cestu o něco delší (konkrétně o 4 a 11 procent). Úměrně tomu je delší také doba zdržení. Vzájemné odchylky nejsou velké

a nelze je označit přímo za chyby, jelikož ani výstup metody particle tracking není přesný. Nevíme, která z metod poskytuje nejpřesnější výsledky.

Celkově lze označit míru shody výstupů statického i dynamického přístupu s výstupem metody particle tracking jako uspokojivou a tyto přístupy považovat za funkční.

Tab. 14 První testovací úloha – kvantitativní srovnání transportních cest

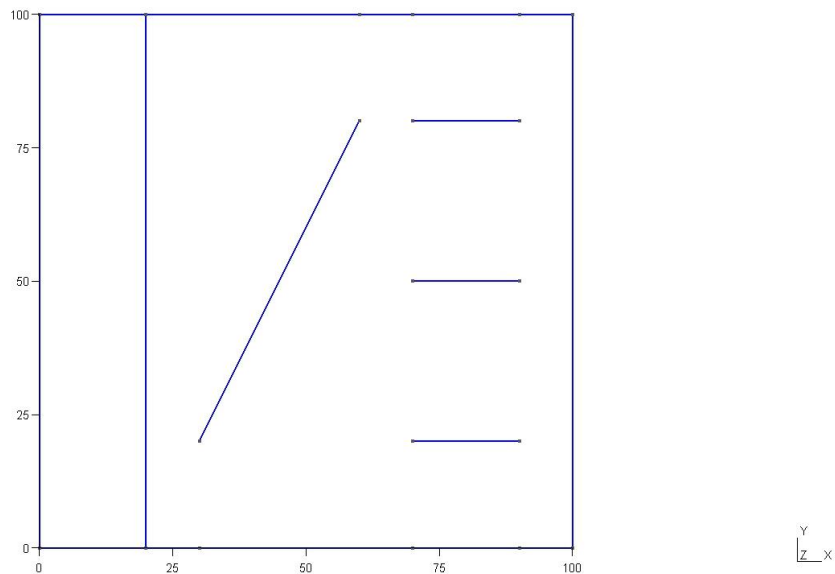
Metoda	Délka cesty [m]	Doba zdržení [s]
Particle tracking	199,8	8312,1
Dynamický přístup	208,3	8497,2
Statický přístup	217,81	8935,0

Závěrem je třeba podotknout, že výpočetní čas potřebný pro vygenerování cesty dynamickým přístupem byl významně větší než čas potřebný pro přístup statický. Transportní cesta má 437 elementů, což znamená minimálně stejně tolik spuštění Flow123D (i více v závislosti na zvoleném parametru τ).

4.4.2 Druhá testovací úloha

První testovací úloha potvrdila použitelnost navržených metod pro hledání transportní cesty. Druhá testovací úloha má za úkol ověřit, jak se dokáží vypořádat s geometrií zahrnující pukliny nižší dimenze (vzhledem k horninové matici).

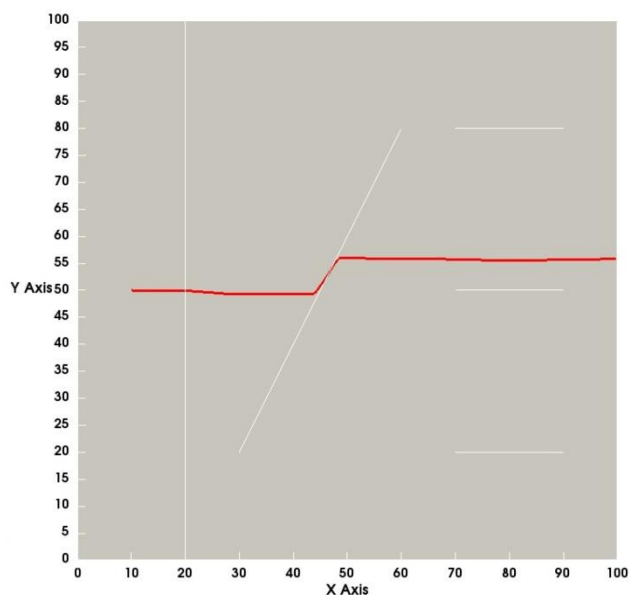
Geometrie úlohy je znázorněna na Obr. 45. Jedná se o 2D oblast 100 x 100 m (v rovině xy) s 1D puklinami (jejich rozevření je 0,01 m). Hydraulická vodivost puklin je o dva řády větší než hydraulická vodivost horniny. Porozita je konstantní v celé oblasti ($= 0,01$). Charakter proudění je dán předepsanými Dirichletovými okrajovými podmínkami konstantní tlakové výšky na hranicích $x = 0$ m ($p = 1$ m) a $x = 100$ m ($p = 0$ m). Uvažovaná počáteční poloha částice je v bodě [10; 50].



Obr. 45 Druhá testovací úloha – geometrie

Výpočetní síť má 691 1D elementů a 68 192 2D elementů.

Výsledek metody particle tracking je znázorněn na Obr. 46. Z něj je patrná nevýhoda této metody popsaná v úvodu, kdy vygenerovaná cesta puklinu nižší dimenze jen kopíruje (či protíná), ale nesplyne s ní, což jednak může způsobit chybné určení transportní cesty a jednak to komplikuje její popis (například z pohledu doby zdržení nebo určení horninového typu, kterým cesta prochází).

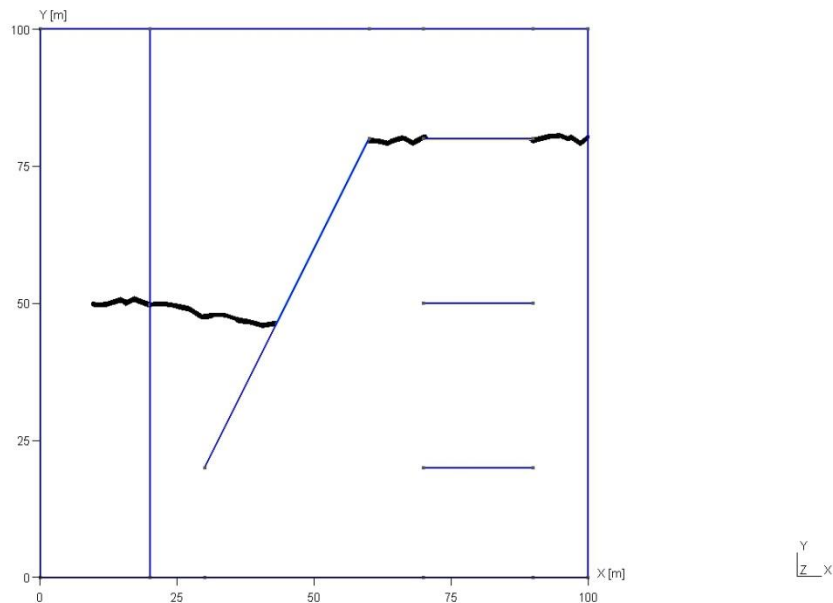


Obr. 46 Druhá testovací úloha – výsledky particle tracking

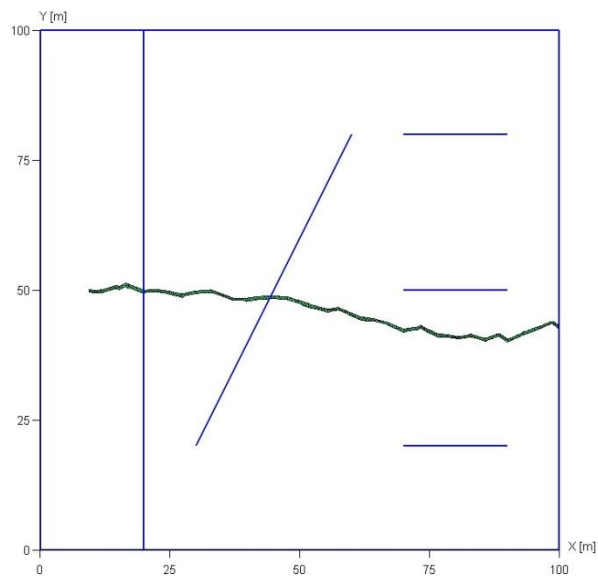
4.4.2.1 Dynamický přístup a vliv parametru τ

Transportní cesta byla zjištěna dynamickým přístupem pro dvě různé volby parametru τ . Výsledky jsou znázorněny na Obr. 47 pro $\tau = 100$ s a na Obr. 48 pro $\tau = 1000$ s.

Je zjevné, že výsledky se od sebe velmi liší. Průběh obou cest je podobný až do okamžiku, kdy narazí na puklinu šikmou vzhledem ke směru tlakového gradientu. Tehdy začne v úloze s kratším dílčím časovým krokem výpočtu ($\tau = 100$ s) transportní cesta splývat s puklinou, kterou opustí až na jejím konci. Oproti tomu v úloze s delším dílčím časovým krokem výpočtu dojde vlivem ředění koncentrací v puklině, kde médium proudí řádově rychleji, k tomu, že transportní cesta puklinu opustí ihned a pokračuje dále horninovou maticí. Z toho plyne, že u dynamického přístupu hledání transportní cesty je třeba jisté obezřetnosti při volbě parametru τ (vzít v potaz rychlosti proudění na oblasti společně s charakteristickou velikostí elementů výpočetní sítě).



Obr. 47 Druhá testovací úloha – dynamický přístup, $\tau = 100$ s



Obr. 48 Druhá testovací úloha – dynamický přístup, $\tau = 1000$ s

4.4.2.2 *Statický přístup a vliv parametru p*

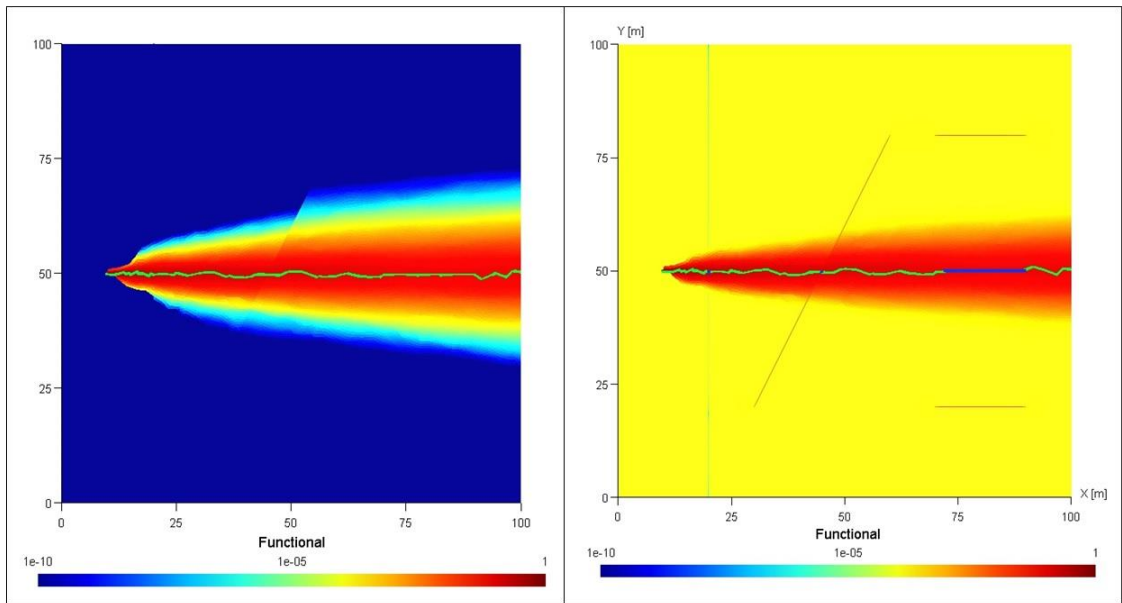
Bylo spočteno proudění a transport. Doba výpočtu transportu byla volena tak, aby výstupní pole koncentrací bylo blízké ustálení (do zdrojového elementu byl umístěn konstantní zdroj koncentrace). Na základě výstupů těchto výpočtů byl spočten funkcionál popsany v kapitole 4.2.2 a vygenerovány transportní cesty pro dvě různé kombinace váhových konstant ω_c a ω_v :

- $\omega_c = 0$ a $\omega_v = 1$: Výsledek je znázorněn na Obr. 50. Uvažována jen rychlost. Transportní cesta očekávaně v nejvyšší možné míře kopíruje pukliny. Představuje „nejrychlejší“ transportní cestu.
- $\omega_c = 1$ a $\omega_v = 0$: Výsledek je znázorněn na Obr. 49 (vlevo). Uvažována jen koncentrace. Představuje „nejvydatnější“ transportní cestu (v daném čase).

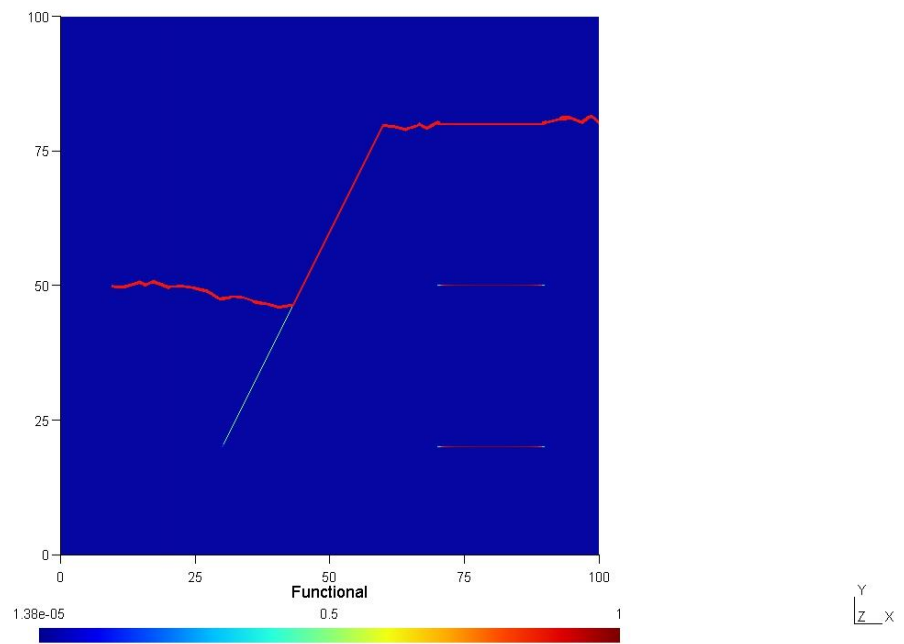
Z výsledků je patrné, že odlišnou volbou váhových konstant byly získány dvě odlišné transportní cesty. Nemusí tomu tak být vždy, závisí to na charakteru zdroje koncentrace a čase vyhodnocení výsledků výpočtu transportu.

Svůj význam mohou mít i jiné kombinace váhových parametrů. Podíváme-li se blíže na Obr. 49 (vlevo), vidíme, že transportní cesta kopíruje prostřední z horizontálních puklin, ale přímo jí neprochází. To je důsledek vyhodnocení funkcionálu počítaného výhradně na základě koncentračního pole v kombinaci s ředěním na puklině. Použijeme-li ale kombinaci vah $\omega_c = 1$ a $\omega_v = 0,01$, transportní cesta již s touto puklinou splyne, její ostatní části pak zůstanou v podstatě nezměněny (Obr. 49 vpravo).

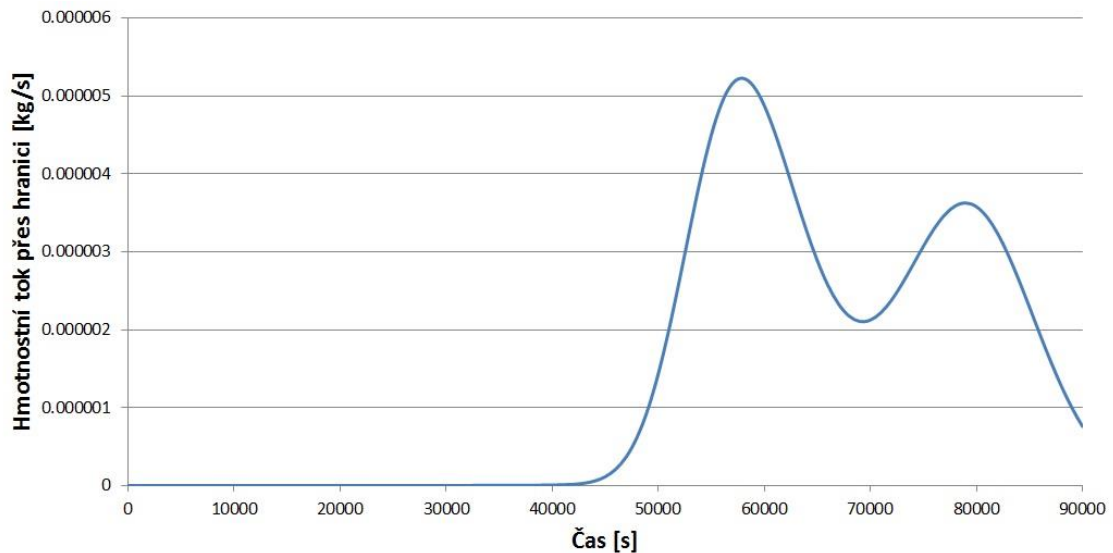
Existence dvou různých transportních cest je pro tuto úlohu doložena na Obr. 51. Jedná se o časový vývoj hmotnostního toku přes hranici simulované oblasti, který byl získán interpretací hmotnostní bilance simulace transportu, kdy ve zdrojovém elementu byla předepsána počáteční podmínka koncentrace 100 kg/m^3 . Každé z obou maxim odpovídá jedné transportní cestě.



Obr. 49 Druhá testovací úloha – statický přístup - $\omega_c = 1$; $\omega_v = 0$ a $p = 0,9$ (vlevo); $\omega_c = 1$; $\omega_v = 0,01$ a $p = 0,9$ (vpravo)

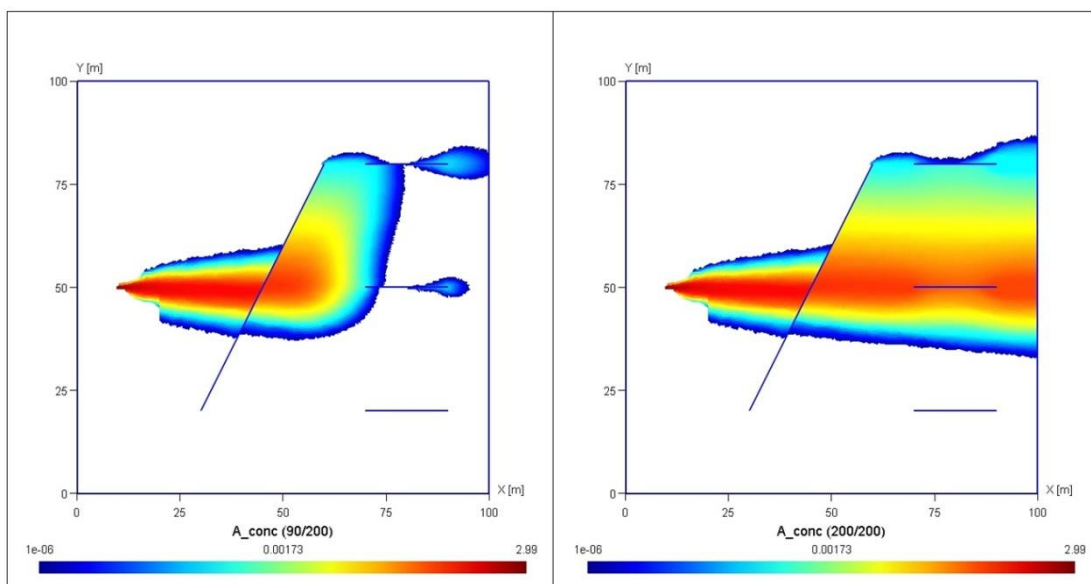


Obr. 50 Druhá testovací úloha – statický přístup ($\omega_c = 0$ a $\omega_v = 1$; $p = 0,9$)



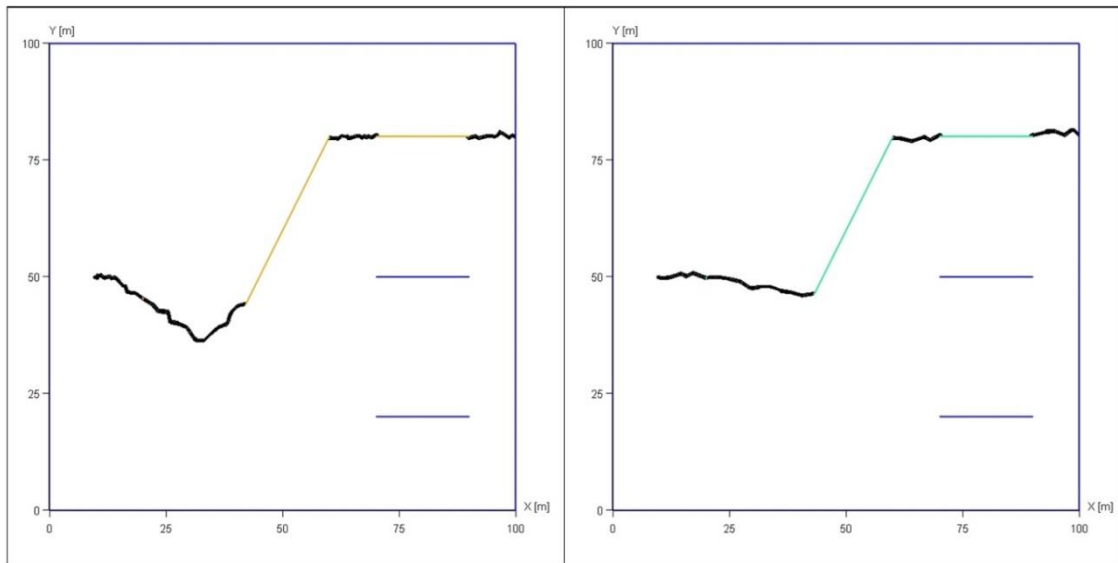
Obr. 51 Druhá testovací úloha – hmotnostní tok přes hranici; zdroj jako počáteční podmínka koncentrace

Dalším dokladem existence dvou transportních cest v této úloze je rozložení koncentrací jakožto výsledků simulace advektivního transportu (Obr. 52). V elementu, jehož těžiště leží nejbližší bodu [10; 50] m byl předepsán konstantní zdroj koncentrace. Je patrné, že v čase 45 000 s (na Obr. 52 vlevo) dojde koncentrace na hranici oblasti nejprve skrze vrchní horizontální puklinu. Oproti tomu na konci simulace (v čase 100 000 s, na Obr. 52 vpravo) je vidět dominantní postup koncentrace skrze prostřední z horizontálních puklin. To je konzistentní s transportními cestami zdokumentovanými na Obr. 49 a Obr. 50.



Obr. 52 Druhá testovací úloha – rozložení koncentrací v čase 45 000 s (vlevo) a 100 000 s (vpravo); konstantní zdroj koncentrace

Na Obr. 53 je dokumentován vliv parametru napřimení statického přístupu hledání transportní cesty ($\omega_c = 0$ a $\omega_v = 1$). Použitím parametru došlo ke zkrácení transportní cesty přibližně o 9 % (Tab. 15), aniž by byl ovlivněn charakter jejího průběhu.



Obr. 53 Druhá testovací úloha – vliv parametru napřimení (vlevo $p = 1,0$; vpravo $p = 0,9$)

4.4.2.3 Zhodnocení

Výše uvedené transportní cesty jsou v Tab. 15 popsány v kontextu své délky a doby zdržení. Údaje v tabulce potvrzují, že transportní cesty vygenerované dynamickým přístupem a přístupem statickým ($\omega_c = 0$; $\omega_v = 1$) jsou téměř shodné, představují nejrychlejší cestu. Tato cesta by správně měla být nalezena rovněž metodou particle tracking, ta však nefunguje správně na výpočetních sítích s elementy různých dimenzí (jak bylo popsáno výše). Vedle nejrychlejší cesty byla statickým přístupem ($\omega_c = 1$; $\omega_v = 0,01$) identifikována ještě cesta další, v textu označovaná jako nejvydatnější. Doby zdržení nejrychlejší a nejvydatnější cesty přibližně odpovídají poloze maxim hmotnostního toku přes hranici (viz Obr. 51). Konečně je v tabulce doložen vliv parametru napřimení u statického přístupu hledání transportní cesty.

Tab. 15 Druhá testovací úloha – kvantitativní srovnání transportních cest

Metoda	Parametry	Délka cesty [m]	Doba zdržení [s]
Particle tracking	-	93,25	86739,5
Dynamický přístup	$\tau = 100$ s	114,83	57714,14
Statický přístup	$\omega_c = 1$; $\omega_v = 0$; $p = 0,9$	94,61	94658,8
Statický přístup	$\omega_c = 1$; $\omega_v = 0,01$; $p = 0,9$	94,44	76145
Statický přístup	$\omega_c = 0$; $\omega_v = 1$; $p = 0,9$	114,84	57738,48
Statický přístup	$\omega_c = 0$; $\omega_v = 1$; $p = 1,0$	126,54	66884,27

4.4.3 Třetí testovací úloha

Třetí a poslední testovací úloha má za úkol ověřit schopnost navržených algoritmů najít transportní cesty v podmínkách blízkých reálné lokalitě. To nám umožní zhodnocení na úloze, jejíž parametry jsou realistické, ale jejíž rozměry a míru heterogenity můžeme omezit za účelem snazšího vyhodnocení.

Jedná se o 3D úlohu se dvěma puklinovými zónami. Její geometrie je znázorněna na Obr. 54 (řez v rovině xz). Horizontální rozsah simulované oblasti je 4000 x 4000 m. Báze oblasti se nachází v nadmořské výšce – 500 m n. m., její povrch osciluje ve směru osy x mezi 250 a 300 m n. m. (oscilace popsána funkcí cosinus s periodou 2000 m). Přípovrchová vrstva, jejíž báze kopíruje průběh povrchu, má mocnost 100 m. Na povrchu je v „údolích“ 50 m na každou stranu (ve směru osy x) od minim z-ové souřadnice povrch označen jako drenážní část (na Obr. 54 zvýrazněno červeně). Zbytek povrchu je považován za část infiltrační.

Okrajové podmínky jsou předepsány následovně:

- Na drenážní části povrchu Dirichletova okrajová podmínka konstantní tlakové výšky 0 m (tzn.: piezometrická výška je rovna nadmořské výšce).
- Na infiltrační části povrchu Neumannova okrajová podmínka konstantního toku $1 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.
- Na zbylých hranicích homogenní Neumannova okrajová podmínka (nulový tok).

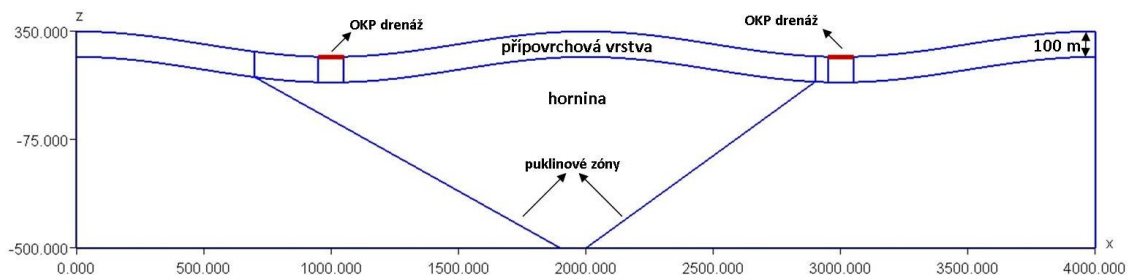
Průběh puklinových zón je rovněž znázorněn na Obr. 54. V přípovrchové vrstvě se puklinové zóny nevyskytují (linie v ní obsažené sloužily jen jako pomocné při tvorbě výpočetní sítě). Mocnost puklinových zón je 1 m.

Uvažovaná počáteční poloha částice je v bodě [2000; 2000; -400].

Parametry modelu jsou shrnuty v Tab. 16.

Úloha byla simulována ve 2D (řez v rovině xz), což umožnilo významně jemnější diskretizaci než v případě, kdy by simulace probíhaly ve 3D (bez dopadu na výsledný charakter proudění, jelikož třetí dimenze vzhledem k průběhu reliéfu nemá pro model žádný význam).

Výpočetní síť má 655 1D elementů a 83 549 2D elementů.

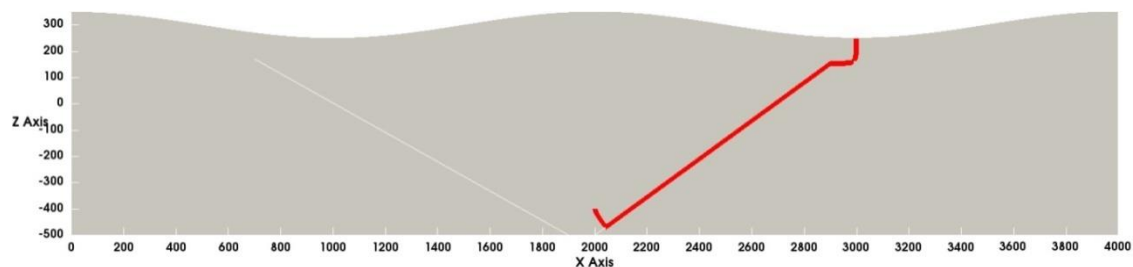


Obr. 54 Třetí testovací úloha – geometrie

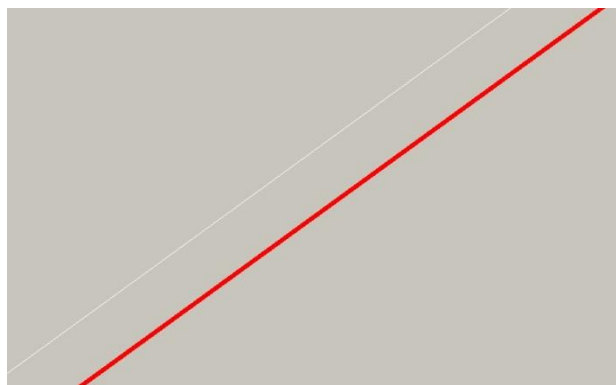
Tab. 16 Třetí testovací úloha – parametry modelu

	Hydraulická vodivost [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]	Porozita [-]
Puklinové zóny	$7\cdot 10^{-7}$	0,1
Hornina	$7\cdot 10^{-10}$	0,01
Přípovrchová vrstva	$7\cdot 10^{-8}$	0,05

Na Obr. 55 je znázorněna transportní cesta získaná metodou particle tracking. Jak již bylo uvedeno výše, metoda nefunguje korektně na výpočetních sítích kombinujících elementy různé dimenze, což se projevilo i v tomto případě, kdy vygenerovaná cesta puklinovou zónu jen těsně kopíruje (viz Obr. 56), ale nesplývá s ní. Důsledkem toho může být chybný popis transportní cesty.

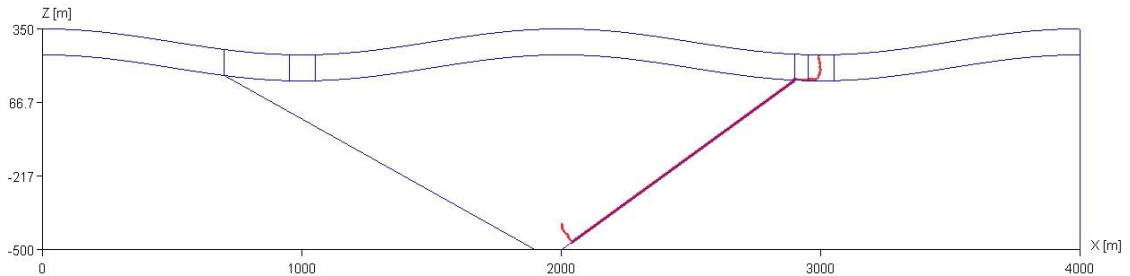


Obr. 55 Třetí testovací úloha – výsledek metody particle tracking



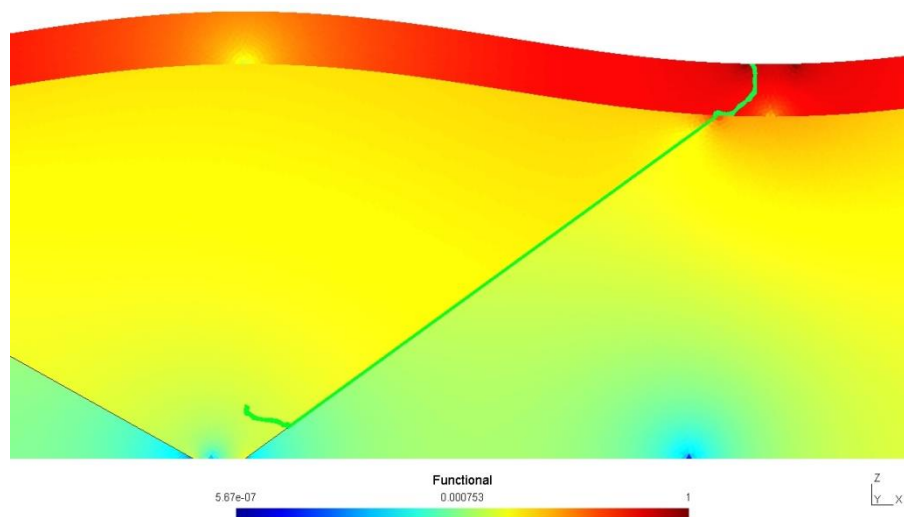
Obr. 56 Třetí testovací úloha – výsledek metody particle tracking - detail

Transportní cesta nalezená dynamickým přístupem (s parametrem $\tau = 10$ dní) je znázorněna na Obr. 57. Z obrázku je patrné, že transportní cesta v maximální možné míře kopíruje puklinovou zónu a končí v drenážní části povrchu (kdyby končila v části infiltrační, znamenalo by to selhání algoritmu).

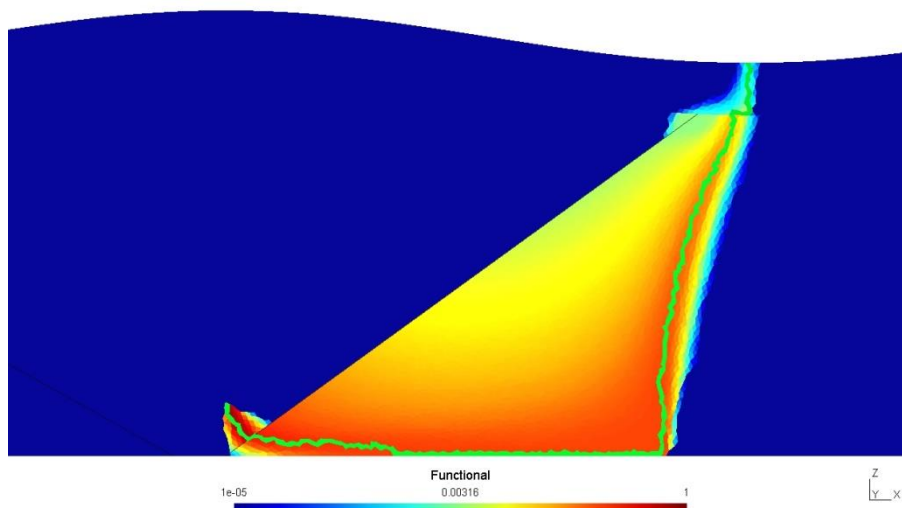


Obr. 57 Třetí testovací úloha – dynamický přístup, $\tau = 10$ dní

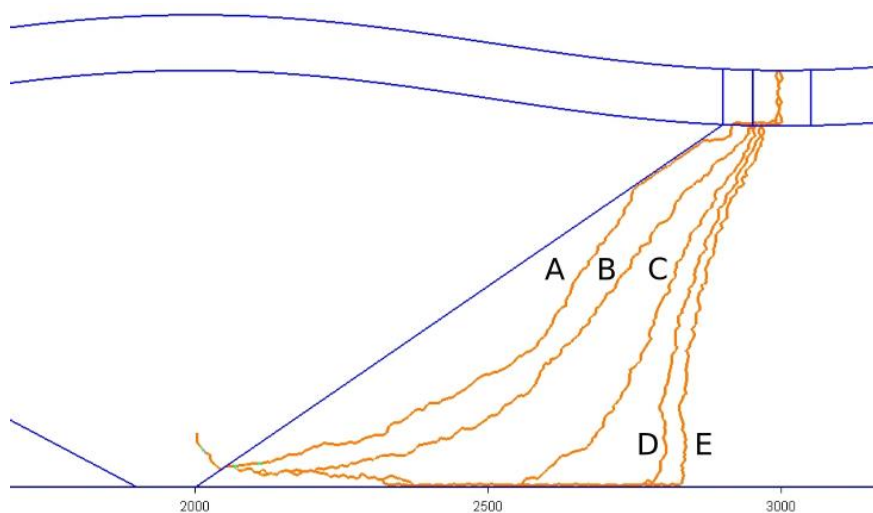
Pro hledání transportní cesty statickým přístupem bylo spočteno proudění a advektivní transport. Doba výpočtu transportu (přibližně 158550 let) byla volena tak, aby výstupní pole koncentrací bylo blízké ustálení (do zdrojového elementu byl umístěn konstantní zdroj koncentrace). Na základě výstupů těchto výpočtů byl spočten funkcionál popsáný v kapitole 4.2.2 (rovnice 26) a vygenerovány transportní cesty pro dvě různé kombinace váhových konstant ω_c a ω_v , stejné, jaké byly popsány u předešlé (druhé) testovací úlohy. Výsledné transportní cesty jsou znázorněny na Obr. 58 a Obr. 59. Průběh transportní cesty generované na základě pole koncentrací (Obr. 59) je závislý na době výpočtu advektivního transportu (mění se plynule až do stavu ustáleného pole koncentrace, poté již zůstává stejný). Tato závislost je ilustrována na Obr. 60.



Obr. 58 Třetí testovací úloha – statický přístup ($\omega_c = 0$ a $\omega_v = 1$; $p = 0,99$)

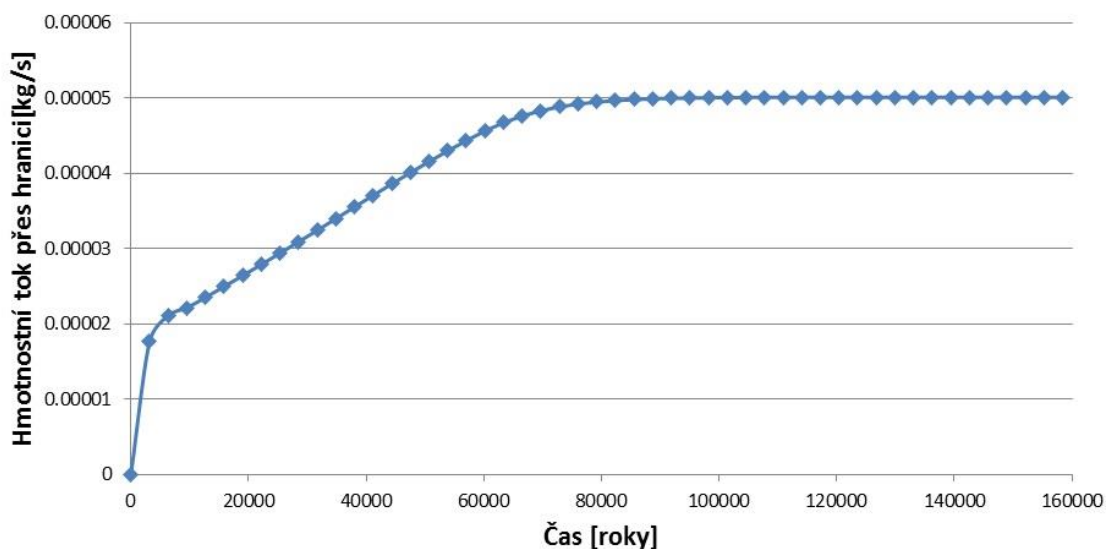


Obr. 59 Třetí testovací úloha – statický přístup ($\omega_c = 1$ a $\omega_v = 0$; $p = 0,99$)

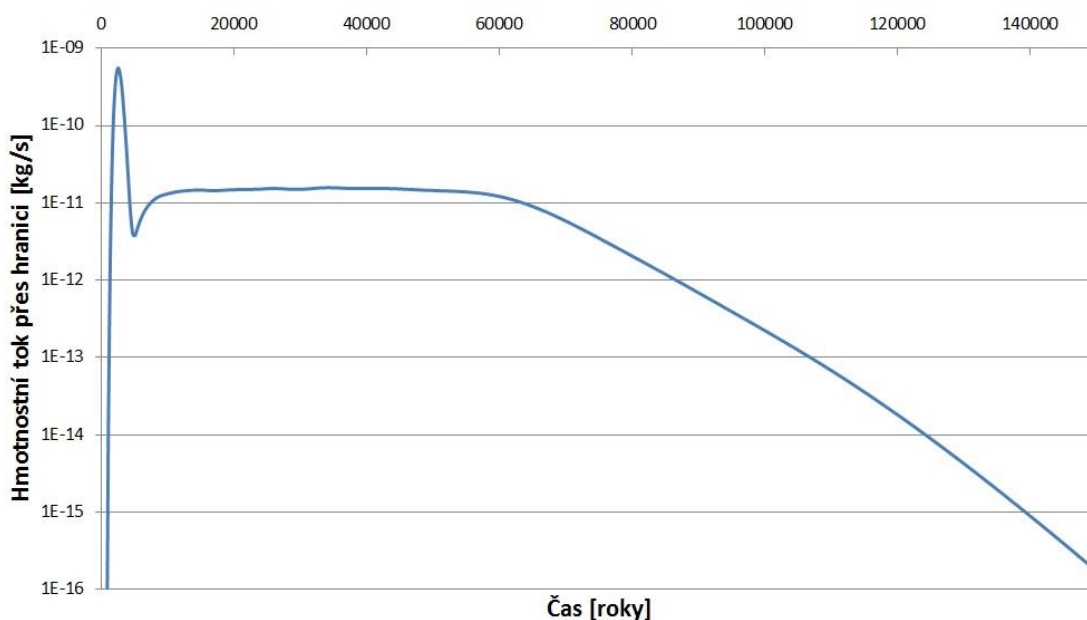


Obr. 60 Třetí testovací úloha – statický přístup ($\omega_c = 1$ a $\omega_v = 0$; $p = 0,99$) – závislost průběhu transportní cesty na čase výstupu pole koncentrací (A = 6342 let, B = 15855 let, C = 31710 let, D = 47565 let, E = 158550 let)

Stejně jako u předchozí úlohy lze i zde identifikovat dvě různé transportní cesty: „rychlou“ a „vydatnou“. Toto je dokumentováno grafem na Obr. 61, ve kterém je vykreslena závislost hmotnostního toku přes drenážní část hranice v závislosti na čase a to v případě konstantního zdroje koncentrace ve zdrojovém elementu. Křivka grafu má dvě různé směrnice růstu. Lze ho interpretovat tak, že koncentrace nejprve proudí na povrch puklinovou zónou (rychlá cesta) a až následně se začne na povrch dostávat i skrz horninovou matici (vydatná cesta). V závislosti na charakteru zdroje kontaminace může nabývat na významu libovolná z těchto dvou cest. V případě konstantního zdroje koncentrace (Obr. 61) se zdá být významnější cesta vydatná, zatímco v případě okamžitého uvolnění koncentrace v čase nula (realizováno formou počáteční podmínky) se zdá být významnější cesta rychlá (Obr. 62), jelikož první maximum je o téměř dva řády vyšší než maximum druhé.



Obr. 61 Třetí testovací úloha – hmotnostní tok přes hranici; konstantní zdroj koncentrace



Obr. 62 Třetí testovací úloha – hmotnostní tok přes hranici; zdroj jako počáteční podmínka koncentrace

Tab. 17 Třetí testovací úloha – kvantitativní srovnání transportních cest

Metoda	Parametry	Délka cesty [m]	Doba zdržení [roky]
Particle tracking	-	1321	2701
Dynamický přístup	$\tau = 10$ dní	1339	2799
Statický přístup	$\omega_c = 0; \omega_v = 1; p = 0,99$	1258	2822
Statický přístup	$\omega_c = 1; \omega_v = 0; p = 0,99$	1802	99273

V Tab. 17 jsou vygenerované transportní cesty popsány z hlediska jejich délky a doby zdržení. Cesty vygenerované metodou particle tracking, dynamickým přístupem

a statickým přístupem na základě výhradně rychlostního pole jsou si podobné. Cesta získaná metodou particle tracking nekopíruje přesně puklinovou zónu, ale probíhá paralelně s ní. Vzdálenost mezi cestou a puklinovou zónou je ale dostatečně malá na to, aby v interpolovaném rychlostním poli cesta procházela tou částí horninové matrice, kde dominují výsledky spočtené v těžištích puklinových elementů. Díky tomu je i doba zdržení takto získané cesty blízka skutečnosti (tedy případu, kdy transportní cesta s puklinou splývá). V případě velmi jemné diskretizace v blízkosti puklinové zóny by tomu tak být nemuselo. Rozdíl mezi parametry transportních cest získaných dynamickým a statickým ($\omega_c = 0$; $\omega_v = 1$) přístupem je dán nepatrně odlišným postupem první části statické cesty k puklinové zóně. To sice znamená celkově kratší trasu, kdy ale větší její část prochází horninovou maticí, což prodlužuje dobu zdržení. Parametry vydatné transportní cesty jsou výrazně odlišné především v kontextu doby zdržení. Je ale třeba nepouštět ze zřetele, že výsledná cesta je vytvářena na základě výstupů simulace transportu v čase téměř 160000 let. Jedná se tedy o situaci, kdy zkoumáme, kudy (a s jakou dobou zdržení) se dostává na povrch nejvíce kontaminace, která se začala uvolňovat před 160000 lety. Oproti tomu nejrychlejší transportní cesta má význam tehdy, když kontaminace vznikne a my zkoumáme, kudy a za jak dlouho se začne dostávat na povrch.

5 Transportní hodnocení modelu reálné lokality

Smyslem této části práce je prokázat aplikovatelnost postupů, které byly uvedeny a popsány výše, na modelu založeném na reálných datech.

V rámci projektu Výzkumná podpora pro bezpečnostní hodnocení hlubinného úložiště (projekt SÚRAO, řešitelem ÚJV Řež a.s., TUL jako subdodavatel) jsou mimo jiné hodnoceny kandidátní lokality pro vybudování hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva. Jedním z klíčových hodnotících kritérií jsou transportní charakteristiky lokality, jejichž určení na základě výsledků matematického modelování je obsahem této kapitoly. Předmětem hodnocení je 7 lokalit (plus 2 přidané dodatečně), z nichž máme díky účasti na tomto projektu k dispozici data pro tvorbu modelu. Není však účelem této práce zabývat se jejich vzájemným srovnáním nýbrž demonstrovat metodiku jejich transportní charakterizace. Jako ukázková úloha pro tuto práci byl použit hydraulický model jedné z kandidátních lokalit (Kráví hora) a na jeho základě provedené výpočty a hodnocení transportu.

Pro zvolenou lokalitu budou nalezeny transportní cesty a to nejprve standardní metodou particle tracking a následně statickým přístupem popsaným v kapitole 4.2.2. Výstupy obou metod budou porovnány, navíc bude demonstrována větší škála využitelnosti přístupu v této práci navrženého. Dynamický přístup (viz kapitola 4.2.1) se pro rozsáhlé modely nehodí, jelikož jejich opakované spouštění by bylo časově velmi náročné.

Východiskem pro níže uvedené analýzy a simulace je hydraulický model lokality ve fázi, v jakém byl v říjnu 2017. Od modelu finálního se liší především mírou kalibrace na úroveň hladin při povrchu. Všechny níže uvedené hodnoty, výstupy prezentovaných metod, tak nelze brát jako jakýkoli indikátor vhodnosti lokality pro vybudování HÚ ani jako srovnávací kritérium ve vztahu k dalším kandidátním lokalitám. Aktuálnější výsledky lze dohledat v průběžných a závěrečných zprávách (jichž jsem spoluautorem) výše zmíněného projektu.

5.1 Model lokality Kraví hora a jeho zhodnocení metodou particle tracking

V této kapitole bude popsáno zhodnocení modelu lokality Kraví hora metodou particle tracking. Hydraulický model, který slouží jako vstup pro navazující analýzy transportních charakteristik, zde nebude blíže popisován, jelikož nebyl autorem práce vytvářen výhradně, ale jen velmi dílčím způsobem. Výjimkou budiž charakterizace okrajových podmínek proudění, které předurčují průběh transportních cest tím, že drenáž umožňují jen v těch povrchových elementech, které jsou protnuty liniemi říční sítě. Na zbylých povrchových elementech je předepsána Neumannova okrajová podmínka konstantního toku reprezentující infiltraci srážek do podzemních vod.

Výpočetní síť modelu je tvořena kombinací 3D elementů (více než 1 500 000) reprezentujících horninovou matici (ekvivalentní kontinuum) a 2D elementů (více než 250 000) reprezentujících zlomová pásma a hraniční elementy.

Zdrojové body pro metodu particle tracking byly umístěny v nadmořské výšce -125 m (přibližně 500 m pod terénním minimem v daném rozsahu) v pravidelné mřížce s krokem 25 m v rozsahu takzvaných homogenních bloků, což jsou polygony vymezené Českou geologickou službou (Trpkošová et al., 2017) jakožto souvislá území v dané nadmořské výšce málo postižená zlomovými pásmi první a druhé kategorie (dle klasifikace SKB, Franěk et al., 2018). Žádné zdrojové body nejsou přítomny do 50 metrů na kteroukoli stranu od zlomových pásem druhé kategorie, které homogenními bloky prochází. Pro výpočet particle tracking bylo použito celkem 6471 zdrojových bodů.

Výpočet i vyhodnocení particle tracking byly automatizovány vlastními skripty v jazyce Python (respektive pypytho pro volání funkcí ParaView).

Rozsahy homogenních bloků byly použity tak, jak byly platné v říjnu 2017, od té doby byly v průběhu řešení projektu aktualizovány. Tyto aktualizace nebyly v práci reflektovány – jednak z důvodu, že práce byla realizována před aktualizací, a jednak proto, že pro tuto práci nejsou ani tak podstatné konkrétní výsledné hodnoty, jako prezentace výhod/nevýhod navrhovaných metod. Situace homogenních bloků spolu s rozsahem modelu a říční sítí jsou znázorněny na Obr. 63.

Na Obr. 64 vlevo jsou znázorněna místa vyústění spočtených cest, vpravo pak rozdělení zdrojových bodů dle povodí drenáže. Vidíme, že polygony homogenních bloků jsou v dané nadmořské výšce drénovány do dvou povodí: Bobruvky na jihozápadě (přibližně 80 % plochy polygonů) a Nedvědičky na severovýchodě (přibližně 20 %). Rozvodnice v úrovni -125 m n. m. přibližně kopíruje tu na povrchu. Rozdíly jsou z větší části dány vlivem přítomnosti zlomového pásma třetí kategorie probíhajícího paralelně s povrchovou rozvodnicí (západně od ní).

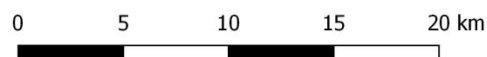
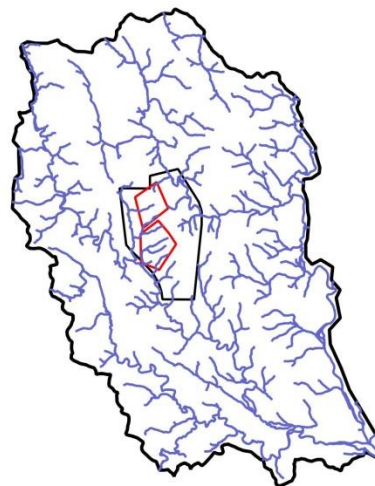
Výsledky cesty byly kvantitativně hodnoceny pomocí jejich délky (Obr. 65) a doby zdržení (Obr. 66). Medián délky cesty je 2334 m, medián doby zdržení 38654 let. Nejkratší cesty jak z pohledu délky (minimum 622 m) tak z pohledu doby zdržení (minimum 2082 let) jsou v jihozápadní části jižního bloku, což je logické (pro daný hydraulický model a pozici bloků), jelikož právě tam jsou okraje polygonů homogenních bloků nejbližší drenážní bázi.

Na základě těchto vyhodnocení byla stanovena nejrychlejší transportní cesta. Její vyústění je znázorněno na Obr. 67 (modrá hvězda). Na témž obrázku je znázorněno místo nejvyšší koncentrace v přípovrchových elementech (zelená hvězda) tak, jak byla zjištěna na základě zpracování výstupů modelu advektivního transportu konzervativního stopovače spočteného se simulační periodou 100 000 let, která byla shledána postačující pro přibližné ustálení koncentračního pole v modelové doméně

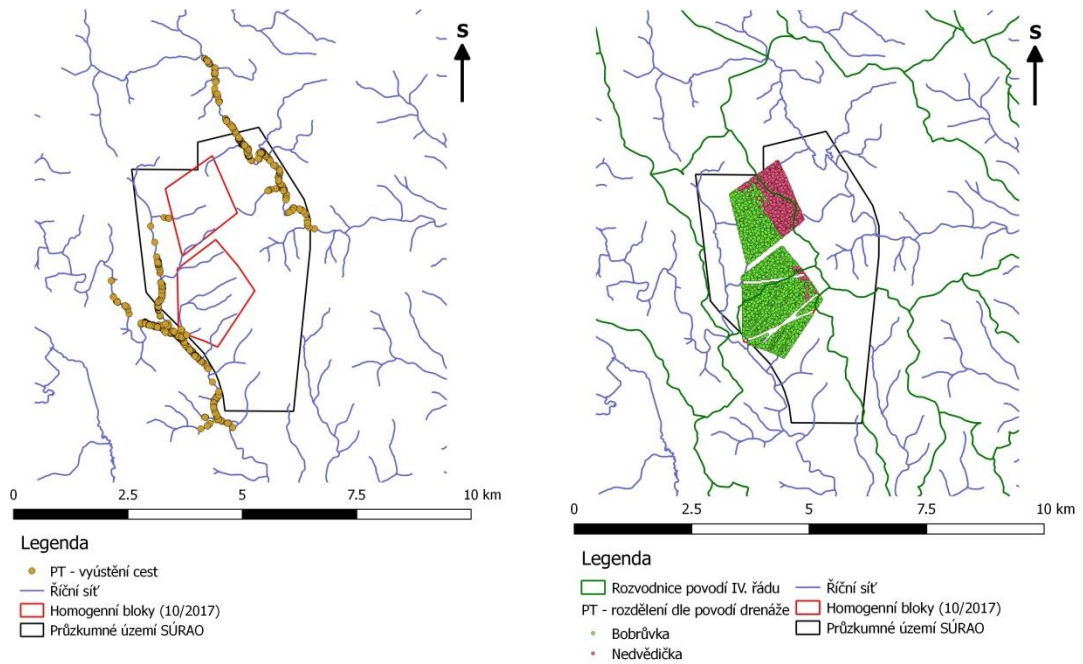
(hodnoceno dle časového vývoje hmotnostního toku přes hranici oblasti). V uvažovaném objemu HÚ odvozeném z rozsahu homogenních bloků byly předepsány konstantní zdroje hmotnosti [hmotnost za čas na jednotku objemu]. Na konkrétní vydatnosti zdrojů nezáleží (pro účely tohoto hodnocení), podstatné je, že poměr maximální ustálené koncentrace při povrchu ke koncentraci v přípovrchovém elementu, v němž končí nejrychlejší cesta, je 2,58. Nejrychlejší cesta tak nutně nemusí být tou nejkritičtější (Z pohledu bezpečnostního hodnocení HÚ).

Legenda

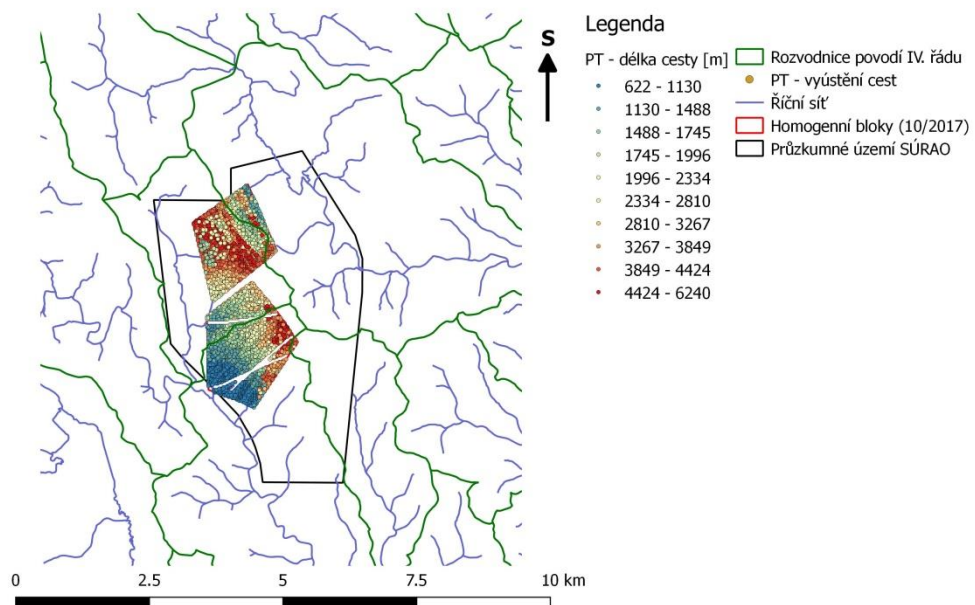
- Říční síť
- Homogenní bloky (10/2017)
- Rozsah modelu
- Průzkumné území SÚRAO



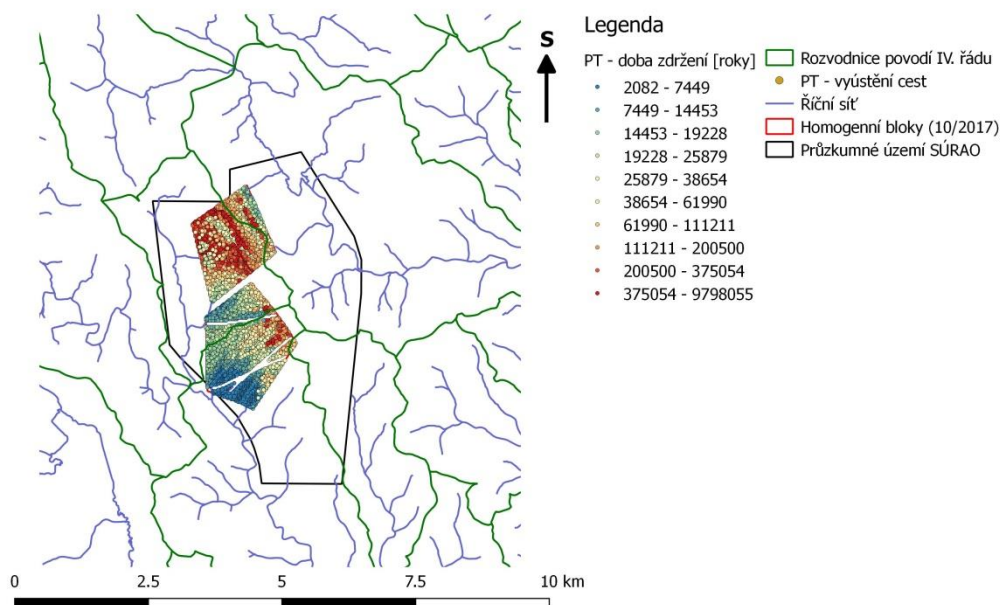
Obr. 63 Kraví hora – rozsah modelu, říční síť a situace homogenních bloků



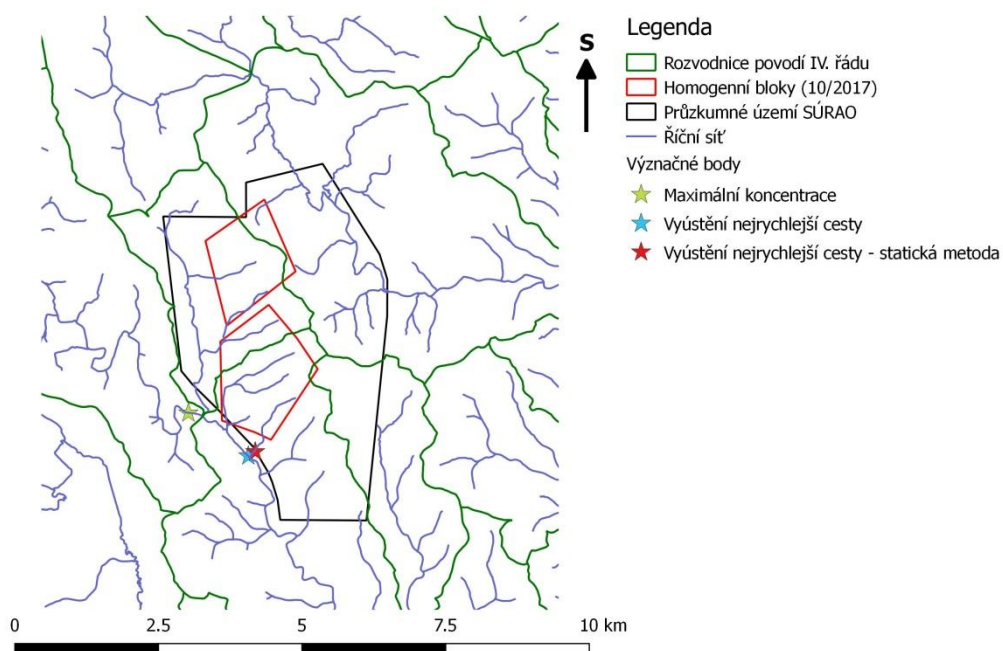
Obr. 64 Kraví hora – particle tracking – vyústění cest a klasifikace zdrojových bodů dle povodí drenáže



Obr. 65 Kraví hora – particle tracking – délka transportních cest



Obr. 66 Kraví hora – particle tracking – doba zdržení



Obr. 67 Kraví hora – význačné body – místo maximální koncentrace při povrchu a vyústění nejrychlejší cesty (particle tracking a statický přístup)

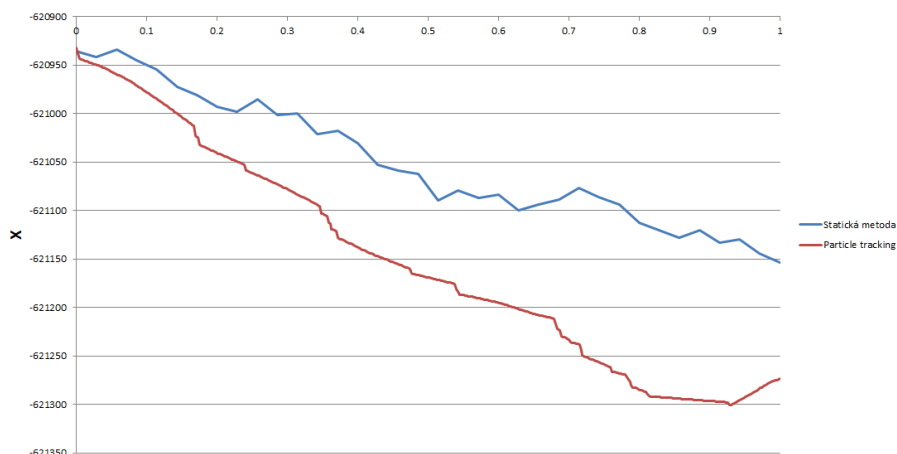
Chceme-li zpětným chodem metody particle tracking určit cestu, která končí v místě s nejvyšší koncentrací (zelená hvězda na Obr. 67), zjistíme, že neuspějeme, jelikož v přípovrchové vrstvě (první desítky metrů pod povrchem) modelové domény jsou řádově vyšší vodivosti (tedy i rychlosti). Vygenerovaná cesta tak postupuje výhradně

přípovrchovou vrstvou, spojuje místo infiltrace s místem drenáže neuvažujíc hlubší oběh.

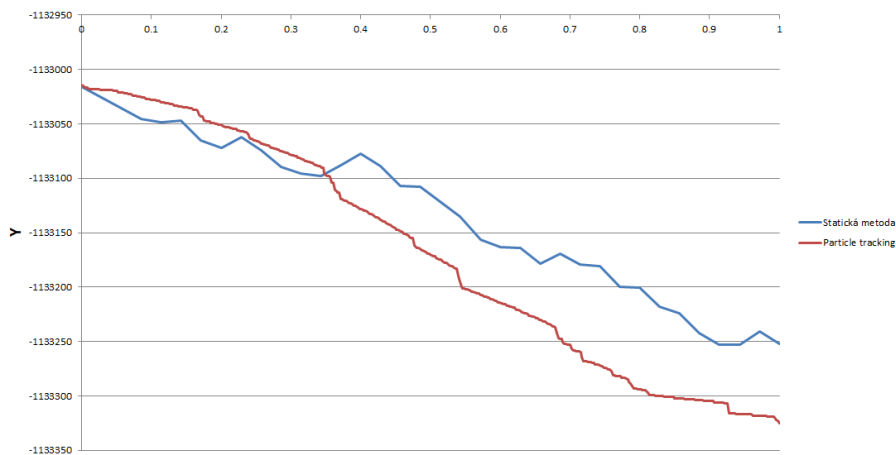
5.2 Statická přístup pro zjištění transportní cesty, srovnání s výsledky particle tracking

S cílem validovat statický přístup na modelu reálné lokality byla jím transportní cesta počítána z elementu, v něm se nachází počátek nejrychlejší transportní cesty zjištěné na základě vyhodnocení particle tracking.

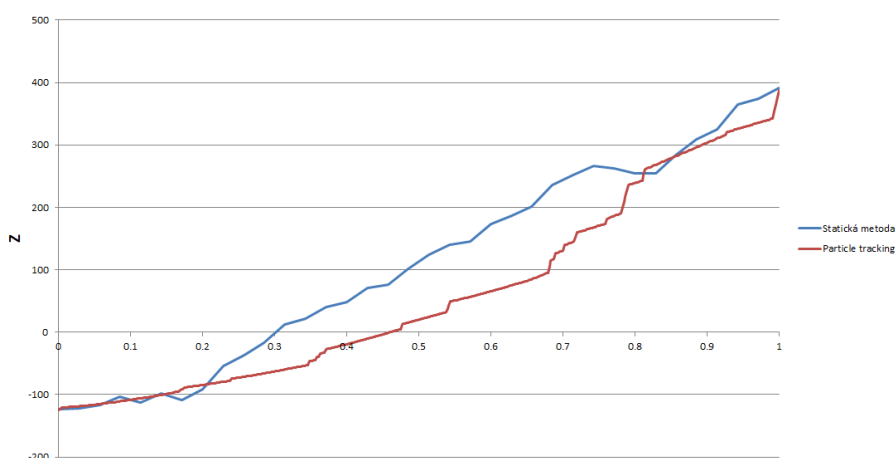
Vyústění takto vygenerované transportní cesty je znázorněno červenou hvězdou na Obr. 67. Z obrázku je patrné, že vyústění cest získaných metodou particle tracking a statickým přístupem jsou si velmi blízko, jejich vzdálenost je přibližně 140 m, což v kontextu diskretizace oblasti znamená, že ústí v sousedních elementech. Srovnání průběhů obou cest v jednotlivých souřadnicích je znázorněno na Obr. 68, Obr. 69 a Obr. 70. Osa x v grafech na obrázcích představuje relativní pořadí bodů cesty, což umožňuje srovnání průběhů při rozdílném počtu bodů ji popisujících. Výsledek statického přístupu je vizualizován pomocí souřadnic těžišť elementů cesty. Z obrázků je patrné, že charakter obou cest je velmi podobný, statický přístup míří strměji k povrchu, drénuje tak blíže zdrojovému bodu, jak již bylo uvedeno výše.



Obr. 68 Srovnání průběhu cest – particle tracking a statický přístup – osa X



Obr. 69 Srovnání průběhu cest – particle tracking a statický přístup – osa Y



Obr. 70 Srovnání průběhu cest – particle tracking a statický přístup – osa Z

Tab. 18 Srovnání cest – délka a doba zdržení

Metoda stanovení	Délka cesty [m]	Doba zdržení [roky]
Particle tracking	815,4	2081,71
Statický přístup	755,44	1519,57

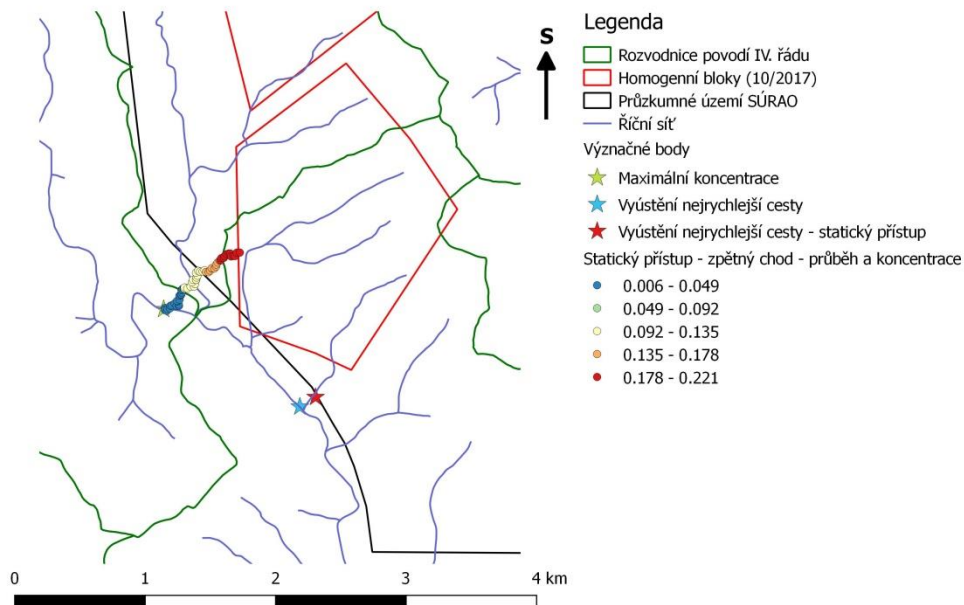
Kvantitativní charakteristiky (délka a doba zdržení) transportních cest jsou srovnány v Tab. 18. Cesta získaná statickým přístupem je kratší a je v ní tak i nižší doba zdržení. To je dáno jejím dřívějším vyústěním.

Celkově lze říci, že použitelnost statického přístupu byla ověřena také na modelu reálné lokality, průběh obou cest je podobný stejně jako jejich kvantitativní charakteristiky.

5.3 Statický přístup – zpětný chod

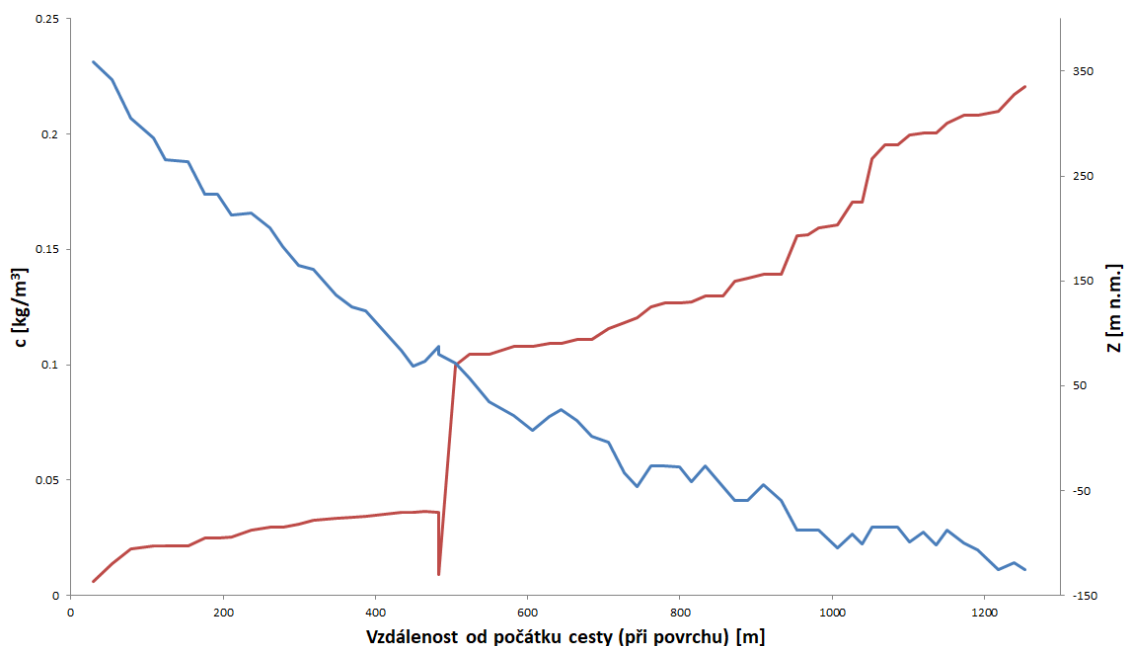
Cílem bylo zjistit cestu, kterou se stopovač dominantně dostává do místa s nejvyšší koncentrací (zelená hvězda na Obr. 67). Byl tak spočten advektivní transport s konstantním zdrojem hmotnosti ve všech elementech homogenních bloků

ve vertikálním rozsahu odpovídajícím předpokládanému umístění HÚ (přibližně 500 m pod minimem elevace terénu v rozsahu polygonů homogenních bloků). Simulační perioda byla nastavena tak, aby došlo k přibližnému ustálení koncentračního pole (100 000 let, kontrolováno dle hmotnostního toku přes hranici oblasti). Výsledné rozložení koncentrací bylo využito pro stanovení transportní cesty (statický přístup, $\omega_c = 1$; $\omega_v = 0$). Projekce jejího průběhu do roviny xy je znázorněna na Obr. 71 včetně barevné škály znázorňující vývoj koncentrace podél ní.



Obr. 71 Statický přístup – zpětný chod – průběh cesty a vývoj koncentrace podél ní (v jednotkách hmotnosti na metr krychlový)

Na Obr. 72 je znázorněn vývoj z-ové složky souřadnic těžišť elementů transportní cesty spolu s vývojem koncentrace v nich. V koncentračním vývoji je dobře vidět okamžik, kdy transportní cesta protíná zlomové pásmo, v němž je vlivem ředění skokově nižší koncentrace. Na obou stranách zlomu je v horninové matici zřetelně různá koncentrace (téměř třikrát vyšší na straně směrem k HÚ).



Obr. 72 Statický přístup – zpětný chod – vývoj hloubky a koncentrace podél cesty

Délka spočtené transportní cesty je 1265 m, doba zdržení v ní je 21362 let. Doba zdržení je sice o řád vyšší, než jaké je minimum, ale stále výrazně nižší, než doba, po kterou je při hodnocení bezpečnosti HÚ vyhodnocována dávka pro hypotetického jedince žijícího v dané oblasti. Dalo by se tak argumentovat, že tato cesta je kritičtější než ta nejrychlejší, jejímž prostřednictvím se k povrchu dostává koncentrace přibližně dvaapůlkrát nižší.

Jak již bylo výše zmíněno, různé nastavení vah ve funkcionalu (rovnice 26), jehož hodnotu statický přístup vyhodnocuje, nám umožňuje větší flexibilitu v chápání toho, jaká transportní cesta je nejkritičtější. Statickým přístupem se nám podařilo nalézt a popsat dvě odlišné transportní cesty, přičemž obě lze chápat jako kritické, což může být velmi užitečné jak při hodnocení bezpečnosti jednotlivých kandidátních lokalit, tak i při výběru lokality finální.

Závěr

Tato práce byla vytvořena se záměrem přispět studiem transportních procesů v geosféře novými poznatky k možnostem bezpečnostního hodnocení hlubinného ukládání vyhořelého jaderného paliva.

Ve své první části se práce zabývala simulací dvou difúzních experimentů, REPRO (WPDE) a LTDE-SD. U obou experimentů se podařilo v dobré míře modelově reprodukovat měřená data, ať už průnikovou křivku v případě REPRO nebo profily koncentrace (aktivity) v horninové matici v případě LTDE-SD. U druhého z experimentů se pro některé ze stopovačů podařilo simulačně postihnout i vývoj aktivity v roztoku radionuklidů, u zbylých stopovačů je špatná míra shody dána patrně chybami měření (či experimentu). Ze simulací difúzních experimentů lze pro případné modely reálných lokalit (a navazující hodnocení bezpečnosti) vyvodit následující poznatky:

- V blízkosti vrtů a rozrážek je třeba počítat s přítomností zóny narušení (EDZ, BDZ), jejíž mocnost a vlastnosti pochopitelně závisí na zvolené metodě těžby/vrtání. Parametry zóny narušení mohou být velmi odlišné od parametrů neovlivněné horniny. Konkrétně lze v zóně narušení očekávat vyšší porozitu a s ní spojenou nižší míru sorpce (i o několik řádů).
- In-situ experimenty jsou důležité. Experimenty laboratorní vždy probíhají na vzorcích, které byly ovlivněny. Inverzní modely in-situ experimentů mohou poskytnout parametry postihující transportní procesy v rostlém masívu.
- Míra sorpce v neporušené a neovlivněné hornině může být až o několik řádů nižší, než odpovídá parametrům zjištěným v laboratoři.
- Diskretizace - na rozhraní puklina/hornina je třeba věnovat zvýšenou pozornost diskretizaci, obzvláště při simulaci transportu silněji sorbujících stopovačů. Může mít výrazný vliv na přesnost výstupů modelu.

Difúze je společně se sorpcí významným procesem způsobujícím retardaci stopovače, což je významné například tehdy, slouží-li geosféra jako bariéra bránící pronikání stopovače do biosféry. Přesnost popisu těchto procesů tak, aby byla postižena realita, je stále předmětem diskuze. Každý realizovaný experiment a každý jeho inverzní i prediktivní model přispívají k upřesnění našich představ o tom, jak stopovače migrují a jaké hodnoty parametrů tuto migraci nejlépe postihují.

Ve své druhé části se práce zabývala problematikou určení transportní cesty v úloze transportu rozpukaným porézním médiem. Byla ukázána úskalí metody particle tracking a navrženy dvě alternativní metody – dynamický přístup založený na opakovaných simulacích transportu s krátkým časovým krokem a statický přístup založený na výpočtu a vyhodnocení funkcionálu rychlosti a koncentrace pro jednotlivé

elementy výpočetní sítě. Společně s těmito metodami byly navrženy postupy pro stanovení parametrů transportní cesty. Použitelnost obou metod byla ověřena na třech testovacích úlohách, jejichž výpočetní síť zahrnovala elementy různé dimenze (koncept modelu kombinující EPM a DFN). Pro statický přístup bylo ukázáno, že různé kombinace vah použitých při výpočtu funkcionálu mohou být využity k ovlivnění charakteru nalezené transportní cesty, což může být přínosné v případě, kdy nás zajímá nejen nejrychlejší cesta ale i ta, kterou je v daném čase přenášeno největší množství látky ze zdroje na hranici oblasti (tato „nejvydatnější“ cesta se může v čase měnit).

Proces stanovení transportní cesty byl následně ukázán na modelu reálné lokality, kdy bylo vyhodnocení nejprve provedeno metodou particle tracking, na jehož základě byla stanovena nejrychlejší transportní cesta. Ze stejného zdroje (počátečních souřadnic) byla poté transportní cesta zjištěna statickým přístupem. Bylo dosaženo dobré shody jak v průběhu obou cest, tak i v jejich kvantitativních charakteristikách.

Větší škála použitelnosti statického přístupu byla demonstrována při stanovení „nejvydatnější“ cesty, kdy byl na základě výsledků simulace advektivního transportu konzervativního stopovače identifikován přípovrchový element s nejvyšší ustálenou koncentrací. Zpětným chodem metody particle tracking nebylo lze stanovit transportní cestu spojující tento element s objemem uvažovaného HÚ. Zpětným chodem statického přístupu to nicméně možné bylo (včetně kvantifikace délky cesty a doby zdržení). Statickým přístupem se nám tak podařilo nalézt a popsat dvě odlišné transportní cesty, přičemž obě lze chápat jako kritické, což může být velmi užitečné jak při hodnocení bezpečnosti jednotlivých kandidátních lokalit, tak i při výběru lokality finální.

Za hlavní úskalí navržených přístupů lze považovat fakt, že transportní cesty jimi nalezené jsou posloupnostmi elementů, nikoli bodů ve spojitém prostoru. Z toho plyne závislost jejich výstupů na diskretizaci, což je nicméně pravda pro každou numerickou metodu včetně particle tracking. Další práce by se nicméně měla zaměřit především na návrh metod poskytujících přesnější kvantitativní popis generovaných cest (jejich délky a doby zdržení).

Závěrem řekněme, že dílčí poznatky mohou posloužit při hodnocení bezpečnosti projektu hlubinného úložiště a významně přispět k získání globálnějších charakteristik (kvalitativních i kvantitativních) postihujících hlavní trendy ovlivňující migraci radionuklidů. Nalezená transportní cesta spolu se svým popisem slouží za vstup komplexnímu modelu transportu, v němž je uvažována mimo jiné také difúze, jejíž parametry v horninové matici, jak bylo ukázáno při simulacích in-situ experimentů, mohou být výrazně odlišné od těch laboratorně zjištěných.

Nedílnou součástí výstupů této práce je rovněž řada scriptů v jazyku Python sloužících pro přípravu vstupů a vyhodnocení výstupů simulačního software Flow123D spolu

s programy pro stanovení transportní cesty a jejich kvantitativního popisu, které přispívají ke zhodnocení SW Flow123D.

Reference

Ahrens, J., Geveci, B. & Law, C., 2005. ParaView: An End-User Tool for Large-Data Visualization. *Visualization Handbook*, pp.717–731. Available at: <http://dx.doi.org/10.1016/b978-012387582-2/50038-1>.

Anderson, J.D. *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*; McGraw Hill Education: New Delhi, India, 1995.

Anttila P., Ahokas H., Front K., Hinkkanen H., Johansson E., Paulamäki S., Riekkola R., Saari J., Saksa P., Snellman M., Wikström L., Öhberg A. (1999c): Final Disposal of Spent Nuclear Fuel in Finnish Bedrock – Olkiluoto Site Report, POSIVA 99-10. 206 s. – Posiva Oy, Olkiluoto, Finsko, ISBN 951-652-065-0.

Ayachit, Utkarsh, *The ParaView Guide: A Parallel Visualization Application*, Kitware, 2015, ISBN 978-1930934306

Bibby, R., 1981. Mass transport of solutes in dual-porosity media. *Water Resour. Res.* 17, 1075–1081.

Brezzi, F., & Fortin, M. (2012). *Mixed and hybrid finite element methods* (Vol. 15). Springer Science & Business Media.

Březina, J. & Hokr, M., 2011. Mixed-Hybrid Formulation of Multidimensional Fracture Flow. *Lecture Notes in Computer Science*, pp.125–132. Available at: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-18466-6_14.

Březina, J.. Mortar-Like Mixed-Hybrid Methods for Elliptic Problems on Complex Geometries. In: D. Ševčovič A. Handlovičová, Z. Minarechová, editor, *ALGORITMY 2012 - 19th Conference on Scientific Computing*, September 9 – 14, 2012. Slovak University of Technology in Bratislava, Publishing House of STU, 2012.

Carrera, J., Sánchez-Vila, X., Benet, I., Medina, A., Galarza, G., Guimerà, J., 1998. Onmatrix diffusion: formulations, solution methods and qualitative effects. *Hydrogeol. J.* 6, 178–190.

Clement, T.P. (1997). RT3D (Version 1.0): A Modular Computer Code for Simulating Reactive Multispecies Transport in 3-Dimensional Groundwater Systems. A Report for the U.S. Department of Energy. Richland, WA: Battelle Pacific Northwest Laboratory, p. 59.

Ferziger, J.H. & Perić, M. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer, 2002. Available at: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-56026-2>

Franěk J., Bukovská Z. A kol. (2018): Závěrečná zpráva 3D strukturně-geologické modely potenciálních lokalit HÚ, Zpráva SÚRAO, č. 229/2018.

Geuzaine, C. and Remacle, J. (2009), Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 79: 1309-1331. doi:10.1002/nme.2579

- Glueckauf, E., 1980. The Movement of Solutes through Aqueous Fissures in Porous Rock. AERE Report R.9823. AERE Harwell, Oxfordshire, UK.
- Grisak, G.E., Pickens, J.F., 1980. Solute transport through fractured media. 1. The effect of matrix diffusion. *Water Resour. Res.* 16, 719–730.
- Grisak, G.E., Pickens, J.F., 1981. An analytical solution for solute transport through fractured media with matrix diffusion. *J. Hydrol.* 52, 47–57.
- Guimerà, J., Carrera, J., 2000. A comparison of hydraulic and transport parameters measured in low-permeability fractured media. *J. Contam. Hydrol.* 41, 261–281.
- Haggerty, R., McKenna, S.A., Meigs, L.C., 2000. On the late-time behavior of tracer test breakthrough curves. *Water Resour. Res.* 36, 3467–3479.
- Hokr M. a kol. (2015): Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů, Zpráva SÚRAO, č. 33/2015.
- Jackson, C.R. 2002. Steadystate particle tracking in the object-oriented regional groundwater model ZOOMQ3D. British Geological Survey Commissioned Report, CR/02/210C.
- Kaukonen V, Hakanen M, Lindberg A, 1997. Diffusion and sorption of Hto, Np, Na, and Cl in rocks and minerals of Kivetty and Olkiluoto, Posiva-97-07, Posiva OY.
- Konikow, L.F., Goode, D.J., and Hornberger, G.Z. (1996). A Three-Dimensional Method-of-Characteristics Solute–Transport Model (MOC3D). U.S. Geological Survey Water Resources Investigation Report 96-4267. Reston, VA: U.S. Geological Survey.
- Löfgren M, K Nilsson, G W Lanyon (2015a): Task 9: Increasing the realism in solute transport modelling – modelling the field experiments of REPRO and LTDE-SD, SKB TF GWFTS, 2015-05-12.
- Löfgren M., Nilsson K. (2015b): Task 9: Increasing the realism in solute transport modelling – modelling the field experiments of REPRO and LTDE-SD, Task description – 9B-1 (DRAFT), SKB TF GWFTS, 2015-10-15.
- Maloszewski, P., Zuber, A., 1990. Mathematical modelling of tracer behaviour in short-term experiments in fissured rocks. *Water Resour. Res.* 26, 1517–1528.
- Neretnieks, I., 1980. Diffusion in the rock matrix: An important factor in radionuclide retardation? *J. Geophys. Res.* 85, 4379–4397.
- Neretnieks, I., 2002. A stochastic multi-channel model for solute transport – analysis of tracer tests in fractured rock. *J. Contam. Hydrol.* 55, 175–211.
- Nilsson, K., Byegård, J., Selner, E., Widestrand, H., Höglund, S., Gustafsson, E. (2010): Long Term Sorption Diffusion Experiment (LTDE-SD). Results from rock sample analyses and modelling. R-10-68.

- Ota, K., Möri, A., Alexander, W.R., Frieg, B., Schild, M., 2003. Influence of the mode of matrix porosity determination on matrix diffusion calculations. *J. Contam. Hydrol.* 61, 131–145.
- Polak, A., Grader, A.S., Wallach, R., Nativ, R., 2003. Tracer diffusion from a horizontal fracture into the surrounding matrix: measurement by computed tomography. *J. Contam. Hydrol.* 67, 95–112.
- Pollock, D.W., 2016, User guide for MODPATH Version 7 -- A particle-tracking model for MODFLOW: U.S. Geological Survey Open-File Report 2016-1086, 35 p., <http://dx.doi.org/10.3133/ofr20161086>.
- Poteri A., Nordman H., Pulkkanen, V-M., Smith P. (2014): Radionuclide Transport in the Repository Near-Field and Far-Field, POSIVA 2014-02. 336 s. – Posiva Oy, Eurajoki, Finsko, ISBN 978-951-652-240-4.
- Roberts, J.E. & Thomas, J.-M., Mixed and hybrid methods, in: *Handbook of Numerical Analysis*, Vol. 2, eds. P.G. Ciarlet and J.L. Lions (Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1991) pp. 523–639.
- Říha, J. a J. Královcová. Generation of transport paths in fractured porous media. *Acta Polytechnica*. 1. vyd., 2017, roč. 57, č. 5. S. 348 – 354. ISSN 1210-2709.
- Savage, D., Soler, J.M., Yamaguchi, K., Walker, C., Honda, A., Inagaki, M., Watson, C., Wilson, J., Benbow, S., Gaus, I., Rueedi, J., 2011. A comparative study of the modelling of cement hydration and cement–rock laboratory experiments. *Appl. Geochem.* 26, 1138–1152.
- Shapiro, A.M., 2001. Effective matrix diffusion in kilometer-scale transport in fractured crystalline rock. *Water Resour. Res.* 37, 507–522.
- Singhal, B. B. S., & Gupta, R. P. (2010). *Applied Hydrogeology of Fractured Rocks*. Springer Netherlands. <https://doi.org/10.1007/978-90-481-8799-7>
- Skagius, K., Neretnieks, I., 1986. Porosities and diffusivities of some nonsorbing species in crystalline rocks. *Water Resour. Res.* 22, 389–398.
- Skagius, K., Pettersson, Michael, Wiborgh, M., Albinsson, Yngve, & Holgersson, Stellan (1999). *Compilation of data for the analysis of radionuclide migration from SFL 3-5 (SKB-R--99-13)*. Sweden
- SKB (2015): Radionuclide transport and dose calculations for the safety assessment SR-PSU. SKB TR-14-09, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Soler, J.M., Pflingsten, W., Paris, B., Mäder, U.K., Frieg, B., Neall, F., Källvenius, G., Yui, M., Yoshida, P., Shi, P., Rochelle, Ch.A., Noy, D.J., 2006. Grimsel Test Site – Investigation Phase V. HPF-Experiment: Modelling Report. Nagra Technical Report NTB 05-01. Nagra, Wetztingen, Switzerland.
- Soler, J.M., Samper, J., Yllera, A., Hernández, A., Quejido, A., Fernández, M., Yang, C., Naves, A., Hernán, P., Wersin, P., 2008. The DI-B in-situ diffusion experiment at Mont Terri: results and modeling. *Phys. Chem. Earth* 33, S196–S207.

Soler, J.M., Watson, C., Wilson, J., Wakiya, A., Oda, C., Akagi, Y., Honda, A., Walker, C., Savage, D., Rüedi, J., Giroud, N., 2014. LCS: NA modelling report – Tournemire. Nagra Arbeitsbericht NAB 13-91. Nagra, Wettingen, Switzerland.

Soler, J. M., Landa, J., Havlova, V., Tachi, Y., Ebina, T., Sardini, P., ... Martin, A. J. (2015). Comparative modeling of an in situ diffusion experiment in granite at the Grimsel Test Site. *Journal of Contaminant Hydrology*, 179, 89–101.
<https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2015.06.002>

Soler J.M, I. Neretnieks, L. Moreno, L. Liu, S. Meng, U. Svensson, P. Trinchero, A. Iraola, H. Ebrahimi, J. Molinero, P. Vidstrand, G. Deissmann, J. Říha, M. Hokr, A. Vetešník, D. Vopálka, L. Gvoždík, M. Polák, D. Trpkošová, V. Havlová, D.-K. Park, S.-H. Ji, Y. Tachi, T. Ito (2017). Task 9A. Evaluation report. Comparison and analysis of results. Currently in review.

Šístek, J., Březina, J. & Sousedík, B., 2015. BDDC for mixed-hybrid formulation of flow in porous media with combined mesh dimensions. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 22(6), pp.903–929. Available at: <http://dx.doi.org/10.1002/nla.1991>.

Trpkošová D. a kol. (2017): Shrnutí procesních modelů lokality Kraví hora a aktualizace parametrů komplexního modelu, Průběžná zpráva SÚRAO, č. 200/2017.

Uhlík J. a kol. (2015): Rešerše zahraničních přístupů k modelování HÚ, metodika a koncepce řešení, Technická zpráva SÚRAO, č. 3/2015.

Vanýsek P. (2009): Ionic conductivity and diffusion at infinite dilution. In: Lide D. R. edit.: CRC handbook of chemistry and physics 90th edition. CRC Press, 2009.

Wersin, P., Baeyens, B., Bossart, P., Cartalade, A., Dewonck, S., Eikenberg, J., Fierz, T., Fisch, H.R., Gimmi, T., Grolimund, D., Hernán, P., Möri, A., Savoye, S., Soler, J., van Dorp, F., Van Loon, L., 2006. Long-Term Diffusion Experiment (DI-A): Diffusion of HTO, I⁻, ²²Na⁺ and Cs⁺: Field Activities, Data and Modelling. Mont Terri Project, Technical Report 2003-06. Mont Terri Project, Saint Ursanne, Switzerland.

Wersin, P., Appelo, C.A.J., Baeyens, B., Bossart, P., Dewonck, S., Eikenberg, J., Fierz, T., Fisch, H.R., Gimmi, T., Grolimund, D., Leupin, O.X., Möri, A., Soler, J.M., van Dorp, F., Van Loon, L., 2010. Long-Term Diffusion (DI-A) Experiment: DIA2: Diffusion of HTO, Br⁻, I⁻, Cs⁺, ⁸⁵Sr²⁺ and ⁶⁰Co²⁺: Field Activities, Data and Modelling. Mont Terri Project, Technical Report 2009-04. Mont Terri Project, Saint Ursanne, Switzerland.

Widestrand, H., J. Byegaard, V. Cvetkovic, E.-L. Tullborg, A. Winberg, P. Andersson, And M. Siitari-Kauppi (2007), Sorbing tracer experiments in a crystalline rock fracture at Aspö (Sweden): 1. Experimental setup and microscale characterization of retention properties, *Water Resour. Res.*, 43, W10413, doi:10.1029/2006WR005277.

Widestrand, H., Byegård, J., Nilsson, K., Höglund, S., Gustafsson, E., Kronberg, M. (2010): Long Term Sorption Diffusion Experiment (LTDE-SD), Performance of main in situ experiment and results from water phase measurements, R-10-67, December 2010, SKB - Svensk Kärnbränslehantering AB, Report.

Willmann, M., G. W. Lanyon, P. Marschall, and W. Kinzelbach (2013), A new stochastic particle-tracking approach for fractured sedimentary formations, *Water Resour. Res.*, 49, doi:10.1029/2012WR012191

Wood, W.W., Kraemer, T.F., Hearn, P.P., 1990. Intragranular diffusion: an important mechanism influencing solute transport in classic aquifers? *Science* 247, 1569–1572.

Zheng, C., Hill, M. C., Cao, G., & Ma, R.. (2012). MT3DMS: Model Use, Calibration, and Validation. *Transactions of the ASABE*. American Society of Agricultural and Biological Engineers (ASABE). <https://doi.org/10.13031/2013.42263>.

Soubor prací autora

Říha J., Rosická D., Šembera J.: A real-world problem simulation using fractured porous medium model, Proceedings of Hydropredict 2010, Paper No. 181.

Říha J.: Zhodnocení empirických metod pro výpočet potenciální evapotranspirace založené na datech z lysimetru v Žitavě, Sborník konference Hydromode 2012.

Severýn, O., Říha, J. a Královcová, J. Návrh metodiky modelování sdružených HM procesů v okolí kavernového PZP v systému Eclipse 300. Technická zpráva, TUL, Liberec, 2012.

Říha J.: Model vodní bilance jezera Chabařovice (Milada), Sborník konference Hydromode 2013.

Říha, J. and Šembera, J. Model of the Water Balance of a Lake Created by Hydrological Recultivation of an Open Pit Coal Mine. In: Conference Modelling 2014, sborník abstraktů, strana 69, ISBN 978-80-86407-47-0.

Říha, J. a Šembera, J. Model vodní bilance jezera Chabařovice (Milada). In: Josef V. Datel, Jan Novotný a Jindřiška Hauerová, ed. Sborník příspěvků XIV. hydrogeologického kongresu Průzkum, využívání a ochrana podzemní vody: nové úkoly a výzvy. Sborník příspěvků II. inženýrskogeologického kongresu Role inženýrského geologa v současnosti. Liberec, 2014: TUL, ČAH, ČAIG. ISBN 978-80-903635-4-0.

Říha J.: Příprava hydrogeologického modelu kandidátní lokality pro hlubinné úložiště vyhořelého jaderného paliva, Sborník konference Hydromode 2015.

Říha, J. a Královcová J. Generation of transport paths in fractured porous media. Acta Polytechnica. 1. vyd., 2017, roč. 57, č. 5. S. 348 – 354. ISSN 1210-2709.

Soler J.M, I. Neretnieks, L. Moreno, L. Liu, S. Meng, U. Svensson, P. Trinchero, A. Iraola, H. Ebrahimi, J. Molinero, P. Vidstrand, G. Deissmann, J. Říha, M. Hokr, A. Vetešník, D. Vopálka, L. Gvozdík, M. Polák, D. Trpkošová, V. Havlová, D.-K. Park, S.-H. Ji, Y. Tachi, T. Ito (2017). Task 9A. Evaluation report. Comparison and analysis of results. Currently in review.

Backers T., Blaheta R., Geier J., Hančilová I., Hasal M., Kwon S., Lanaro F., Meier T., Min K.-B., Pettersson C.-H., Říha J.: Reliability, Feasibility and Singnificance of Measurements of Conductivity and Transmissivity of the Rock Mass for the Understanding of the Evolution of a Repository of Radioactive Waste, SSM Report ref. Nr.: SSM2016-1671, Strålsäkerhetsmyndighete (Swedish Radiation Safety Authority), Stockholm, 2018.

Říha J. a kol. (2016): Transportní modely – průběžná zpráva, Technická zpráva SÚRAO, č. 47/2016.

Říha J. a kol. (2017): Transportní modely – průběžná zpráva, Technická zpráva SÚRAO, č. 270/2018.

Hokr M., Říha J., Trpkošová D., Havlová V., Vopálka D. (2015): Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – průběžná zpráva, Technická zpráva SÚRAO, č. 33/2015.

Hokr M., Říha J., Havlová V., Gvoždík D., Vetešník A. a kol.: (2016): Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – první etapa řešení (task 9A a 9B) – průběžná zpráva, Technická zpráva SÚRAO, č. 77/2016.

Hokr M., Říha J., Havlová V., Gvoždík D., Vetešník A. a kol.: (2017): Testování transportních modelů s využitím in-situ zahraničních experimentů – průběžná zpráva za druhou etapu řešení, Technická zpráva SÚRAO, č. 172/2017.

Maryška J., Blaheta R., Hokr M., Říha J. a kol. (2017): Vývoj a ověřování metodik modelování THMC procesů v rámci mezinárodního projektu DECOVALEX 2019 – první etapa řešení – průběžná zpráva - Technická zpráva SÚRAO, č. 233/2018.

Trpkošová, D., Hustáková, H., Dobrev, D., Havlová, V., Bukovská, Z., Franěk, J., Rataj, J., Fejt, F., Vetešník, A., Baborová, L., Vopálka, D., Polák, M., Uhlík, J., Gvoždík, L., Černý, M., Královcová, J., Říha, J., Březina, J. (2017): Transport radionuklidů z úložiště / Bezpečnostní rozbor HÚ v lokalitě Kraví hora. Technická zpráva SÚRAO, č. 189/2017.

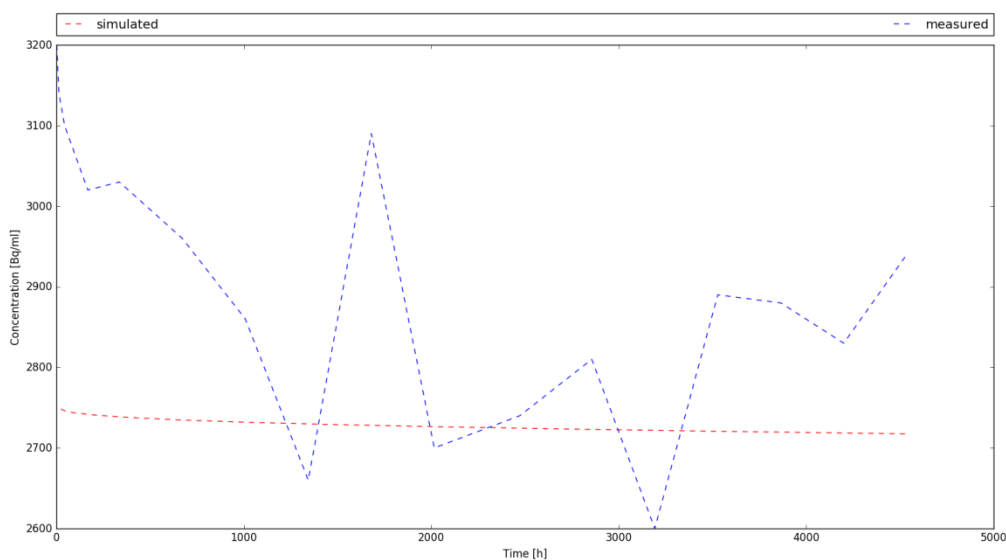
Trpkošová, D., Havlová, V., Bukovská, Z., Franěk, J., Rataj, J., Frýbort, J., Kobyłka, D., Losa, E., Fejt, F., Vopálka, D., Baborová, L., Štamberg, K., Vetešník, A., Vaněček, V., Jan Uhlík, Gvoždík, L., Milický, M., Polák, M., Královcová, J., Říha, J., Jiří Maryška, J. (2017): Transport radionuklidů z úložiště / Bezpečnostní rozbor HÚ v lokalitě Kraví hora. Shrnutí procesních modelů lokality Kraví hora a aktualizace parametrů komplexního modelu. Technická zpráva SÚRAO, č. 200/2017.

Příloha A

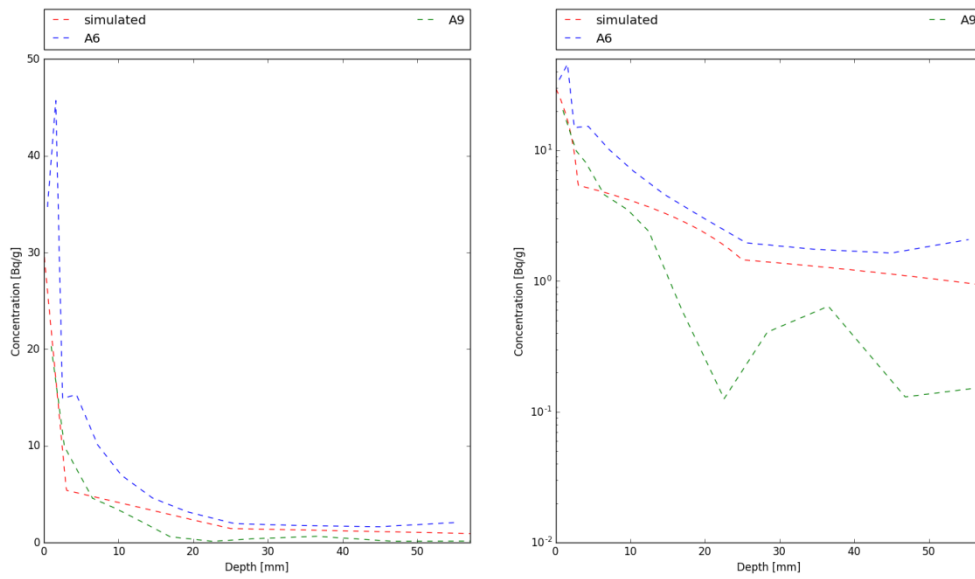
Obsahem této přílohy jsou výsledky druhé etapy simulací experimentu LTDE-SD neuvedené v kapitole 3.2.1.2.

Výsledky pro Na-22 jsou znázorněny na Obr. A 1 a Obr. A 2. Průběhy na prvním obrázku ukazují na možnou chybu měření, jelikož aktivita v roztoku změřená na počátku simulace je vyšší, než odpovídá injektovanému množství. Shoda koncentračních profilů v horninové matici zůstala dobrá. Prakticky totéž lze konstatovat o výsledcích pro Cl-36 (viz Obr. A 3 Obr. A 4).

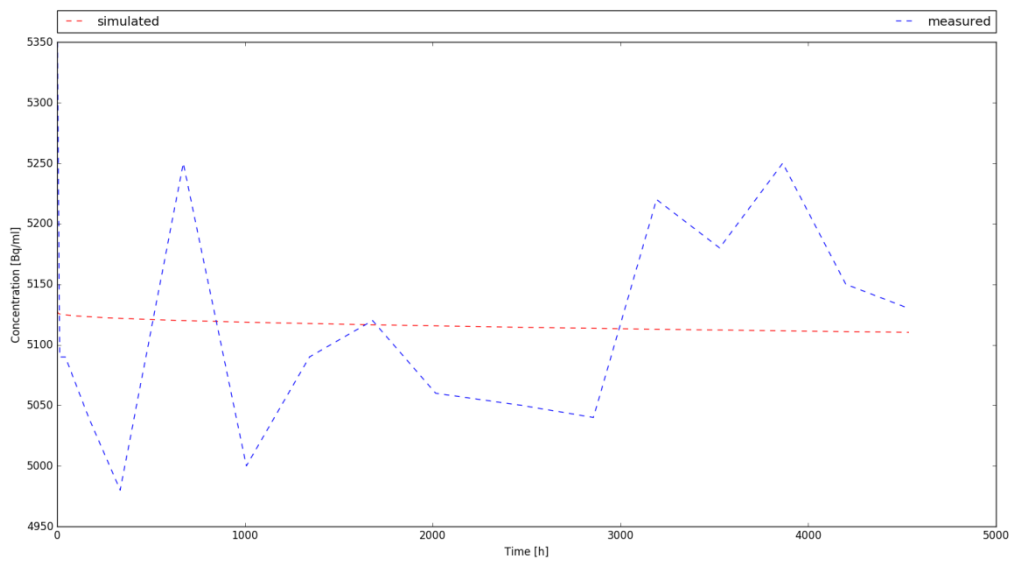
Na Obr. A 5 a Obr. A 6 jsou znázorněny výsledky pro Co-57. Měřené koncentrace v tanku klesají řádově rychleji než koncentrace simulované. To se podepsalo i na simulovaných profilech v hornině, které se poněkud odchýlily od svých měřených protějšků. Principiálně to samé (i když v menší míře) platí také pro Ba-133, viz Obr. A 7 a Obr. A 8.



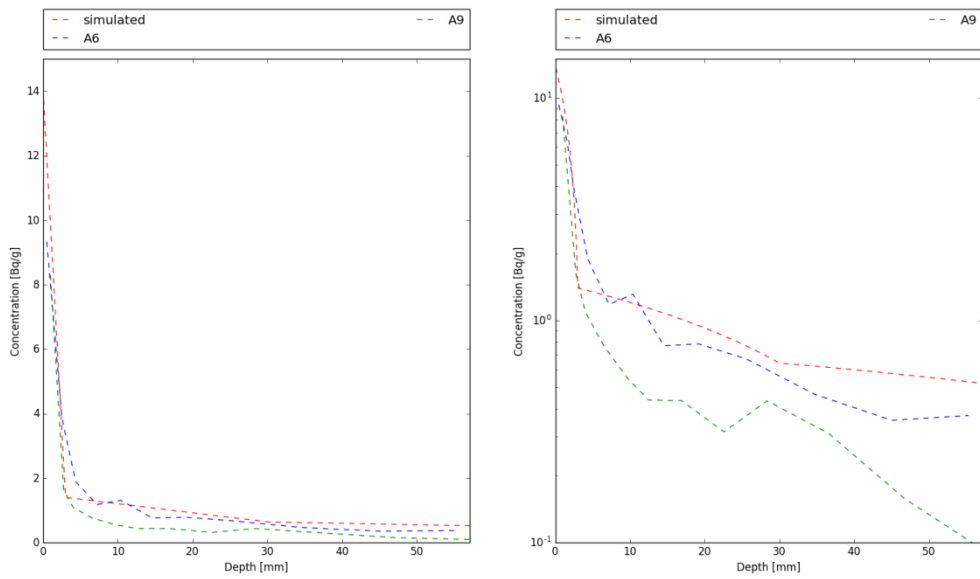
Obr. A 1 LTDE-SD – model roztoku – Na-22



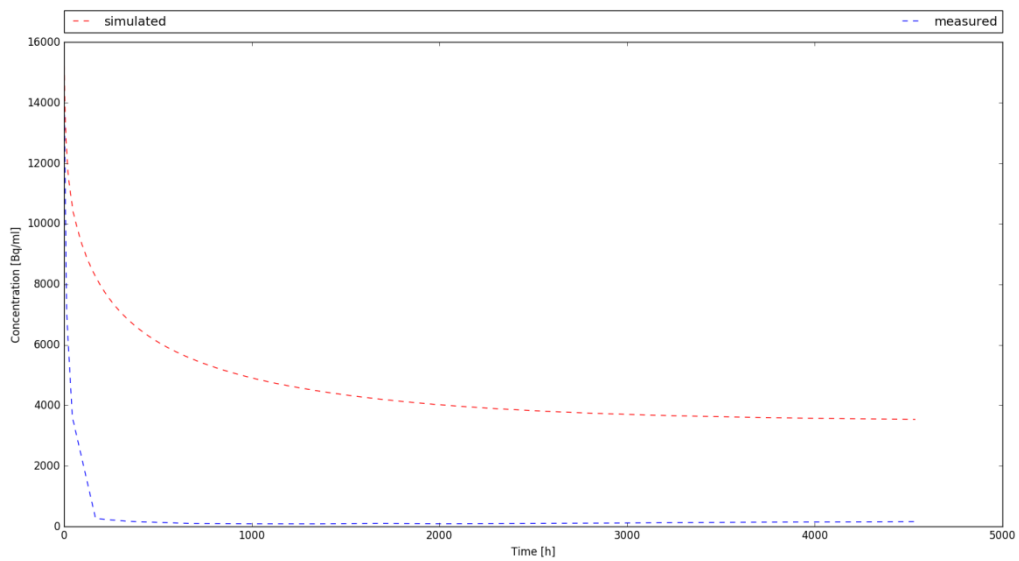
Obr. A 2 LTDE-SD – Etapa_2 – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Na-22



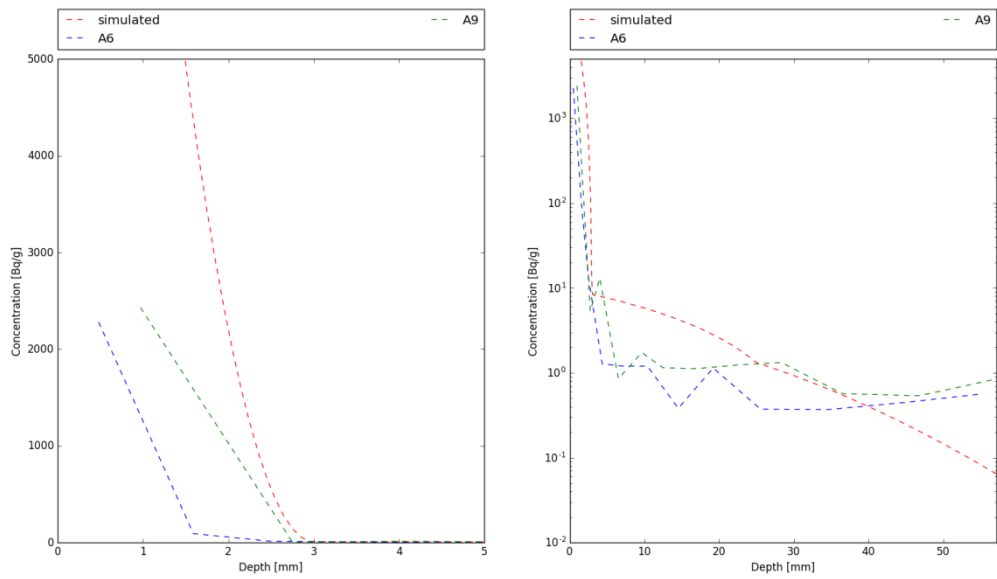
Obr. A 3 LTDE-SD – model roztoku – Cl-36



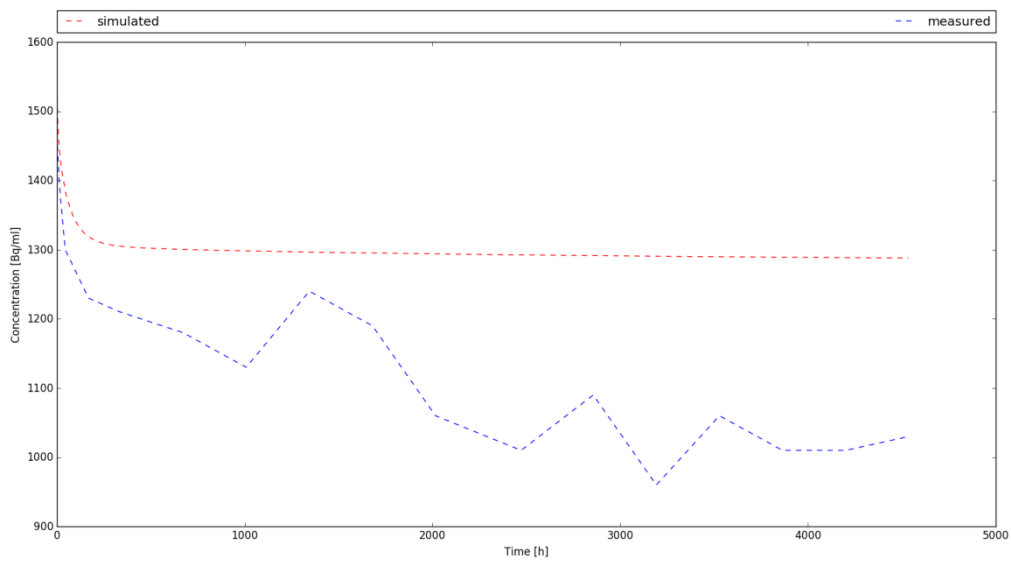
Obr. A 4 LTDE-SD – Etapa_2 – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Cl-36



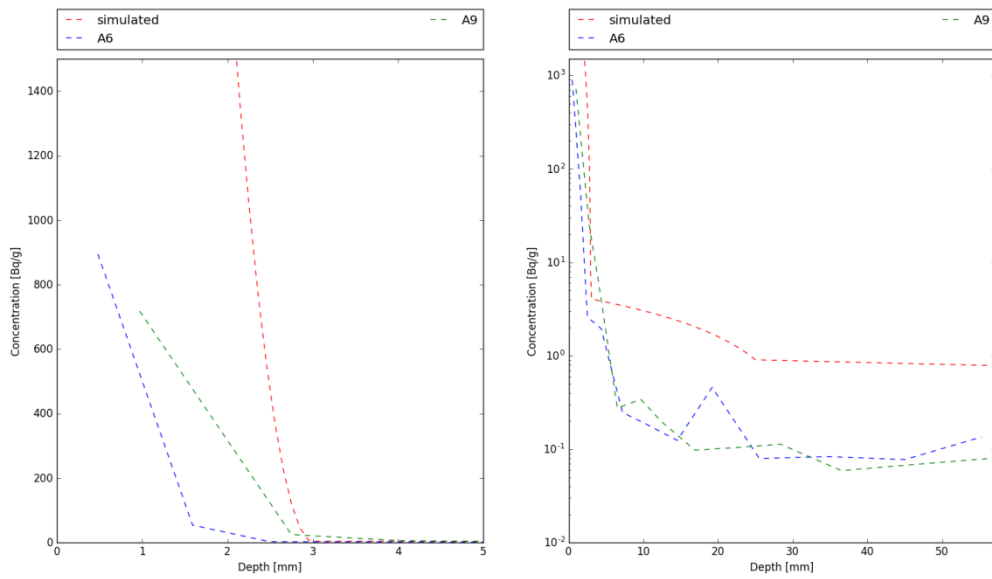
Obr. A 5 LTDE-SD – model roztoku – Co-57



Obr. A 6 LTDE-SD – Etapa_2 – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Co-57



Obr. A 7 LTDE-SD – model roztoku – Ba-133



Obr. A 8 LTDE-SD – Etapa_2 – koncentrační profily v hornině v lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) škále – Ba-133