

Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií

Studijní program: B 2612 – Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: Informatika a logistika

Bakalářská práce

Autor: **Ondřej Matoušek**

Vedoucí práce: Ing. Josef Chudoba, Ph.D.

Datum odevzdání: 21.5.2010

Prohlášení

Byl(a) jsem seznámen(a) s tím, že na mou diplomovou 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 diplomové práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li diplomovou 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.

Diplomovou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

Datum

Podpis

Poděkování

Na tomto místě bych chtěl mockrát poděkovat všem, kteří mi při zpracování bakalářské práce pomáhali. V první řadě děkuji vedoucímu práce Ing. Josefu Chudobovi, Ph.D. za jeho čas, vedení, rady a poskytnuté materiály. Samozřejmě děkuji za podporu nejbližší rodině a přátelům.

Anotace

Cílem bakalářské práce je provést citlivostní analýzu vstupních parametrů pro hlubinné úložiště radioaktivních odpadů v oblasti melechovského masivu.

Teoretická část je zaměřena na popis oblasti, ve které se úložiště nachází. Dále popisuje vstupy do základní úlohy a typy citlivostních analýz. Část bakalářské práce „základní příklad“ zobrazuje celý postup simulace na vstupních datech získaných od geologů. Kapitola obsahuje základní informace o výpočetním programu Flow123D a podrobnější popis vstupních a výstupních souborů, které pro citlivostní analýzu využíváme. Dále obsahuje informace o vizualizačním softwaru GMSH a možnostech jak pomocí tohoto softwaru zobrazovat výstupní data.

V části citlivostní analýza je popsáno, jakým způsobem získáváme nová vstupní data do modelu. Obsahuje popis vstupních dat zvoleným statistickým rozdělením a generování nových vstupních dat a souborů pomocí programu Microsoft Excel.

Práce se zabývá citlivostní analýzou, kdy vstupy jsou generovány pomocí metody Monte Carlo a jsou sledovány výsledky realizací pokusu. Výstupem z vypočtených realizací jsou pravděpodobnostní grafy, které jsou následně zhodnoceny.

Klíčová slova

hlubinné úložiště radioaktivních odpadů

citlivostní analýza

hydraulická vodivost

metoda Monte Carlo

Flow 123D

Annotation

The objective of the bachelor's thesis is to execute the sensitivity analysis of input parameters for a radioactive waste depository in the melechovsky massif.

The theoretical part is focused on the description of the area where the depository is situated. Then, the input for the basic task and sensitivity analysis are described. The part of the bachelor's thesis "basic task" presents the complete simulation process based on data obtained from geologists. The chapter contains basic information about Flow123D program and more detailed description of input and output files which are used for a sensitivity analysis. Also this chapter contains information about the visual software GMSH and its possible ways how to display the output information.

The "sensitivity analysis" part describes ways of obtaining the input data for the model. It contains the description of input data of chosen statistic division and generating of new input data and files with help of Microsoft Excel Program.

This thesis deals with the sensitivity analysis where the input data are generated by a method Monte Carlo and the results of realization are monitored. The probability graphs are the outcome of counted realizations, these graphs are subsequently evaluated.

Key words

underground repository of radioactive waste

sensitivity analysis

hydraulic conductivity

method Monte Carlo

Flow 123D

Úvod	11
Teorie.....	13
1 Popis oblasti	13
1.1 Koncepce modelu.....	13
1.2 Geometrie oblasti	14
1.3 Výpočetní síť	15
2 Popis vstupů do modelu	17
2.1 Fyzikální vlastnosti prostředí.....	17
2.2 Okrajové podmínky proudění	18
2.3 Okrajové a počáteční podmínky transportu.....	18
2.4 Varianta výpočtu transportu	18
3 Typy citlivostních analýz	20
Základní příklad	22
4 Výpočetní program Flow123D.....	22
5 Soubory se vstupními daty	23
5.1 Vstupní soubor materiálů „mm.mtr“	23
5.2 Soubor nastavení flow_t.ini	25
6 Výstupní hodnoty koncentrací na elementech	27
7 Vizualizace pomocí softwaru GMSH.....	29
7.1 Možnosti zobrazení pomocí softwaru GMSH	29
Citlivostní analýza vstupních parametrů	32
8 Statistika.....	32
8.1 Logaritmicko normální rozdělení.....	32
8.2 Výpočet směrodatné odchylky.....	33
9 Generování vstupů.....	34
10 Výpočet	36
11 Výstupy z realizací	38

11.1	Zobrazení výstupů pomocí softwaru GMSH	38
11.2	Zpracování výstupů formou pravděpodobnostních grafů	40
11.2.1	Program pro získávání hodnot koncentrací	40
11.2.2	Zpracování sad koncentrací v programu Microsoft Excel	43
11.3	Pravděpodobnostní grafy koncentrace radioaktivní látky.....	44
11.3.1	Povrchový element.....	45
11.3.2	Element v blízkém okolí úložiště.....	48
Závěr.....		52
12	Citovaná literatura	54
Přílohy		56

Seznam obrázků

Obrázek 1 - Geologická struktura oblasti melechovského masivu. [3].....	14
Obrázek 2 - Vizualizace připravené geometrie a výpočetní síť modelu v programu GMSH. [3].....	15
Obrázek 3 - Podklady pro přípravu matematického modelu pro oblast melechovského masivu. Zelená linie – vymezení simulované oblasti, oranžové linie – referenční síť tektonických zlomů, černé linie – tektonické prvky s ověřenou nebo předpokládanou hydrogeologickou funkcí. [2].....	16
Obrázek 4 - Vybraná pozice zdrojového členu. [3]	19
Obrázek 5 - Vstupní soubor mm.mtr bez vstupních hodnot.	24
Obrázek 6 - ukázka konfiguračního souboru flow_t.ini.....	26
Obrázek 7 - Soubor "mm_t.pos" po odstranění dat.....	28
Obrázek 8 - Povrch melechovského masivu zobrazený pomocí softwaru GMSH	29
Obrázek 9 - Nastavení řezu oblastí	30
Obrázek 10 - Úvodní menu programu GMSH s označeným zobrazením řezu	30
Obrázek 11 - Graficky zobrazené šíření látky zobrazené pomocí programu GMSH pro časy 1000, 3000 a 5000 let, na nadmořské 0 m.n.m.	31
Obrázek 12 - část šablony s označenými novými daty.....	35
Obrázek 13 - vstupní soubor mm.mtr s novými daty	35
Obrázek 14 - dialogové okno programu Flow123D.....	36
Obrázek 15 - ukázka části souboru mm.log.....	36
Obrázek 16 - Graficky zobrazené šíření látky pro nízké hodnoty hydraulických vodivostí zobrazené pomocí programu GMSH pro časy 1000, 3000 a 5000 let, , na nadmořské 0 m.n.m.	38
Obrázek 17 - Barevné spektrum koncentrace a barvám odpovídající hodnoty pro nízké hodnoty hydraulických vodivostí	38
Obrázek 18 - Graficky zobrazené šíření látky pro střední hodnoty hydraulických vodivostí zobrazené pomocí programu GMSH pro časy 1000, 3000 a 5000 let, , na nadmořské 0 m.n.m.	39
Obrázek 19 - Barevné spektrum koncentrace a barvám odpovídající hodnoty pro střední hodnoty hydraulických vodivostí	39

Obrázek 20 - Graficky zobrazené šíření látky pro vysoké hodnoty hydraulických vodivostí zobrazené pomocí programu GMSH pro časy 1000, 3000 a 5000 let, , na nadmořské 0 m.n.m.	39
Obrázek 21 - Barevné spektrum koncentrace a barvám odpovídající hodnoty pro vysoké hodnoty hydraulických vodivostí.....	39
Obrázek 22 - Program pro vyhledávání a ukládání koncentrací na elementech.....	41
Obrázek 23 - Program v průběhu vyhledávání	41
Obrázek 24 - Koncentrace uložené programem.....	44
Obrázek 25 - Koncentrace seřazené podle velikosti a s hodnotami pravděpodobnosti	44

Seznam grafů

Graf 1 - Pravděpodobnosti koncentrací na povrchovém elementu 17693 v čase 500let.....	45
Graf 2 - Pravděpodobnosti koncentrací na povrchovém elementu 17693 v čase 1500let.....	46
Graf 3 - Pravděpodobnosti koncentrací na povrchovém elementu 17693 v čase 3000let.....	46
Graf 4 - Pravděpodobnosti koncentrací na povrchovém elementu 17693 v čase 5000let.....	47
Graf 5 - Pravděpodobnosti koncentrací na elementu blízkém úložišti 19657 v čase 1000let	49
Graf 6 - Pravděpodobnosti koncentrací na elementu blízkém úložišti 19657 v čase 3000let	50
Graf 7 - Pravděpodobnosti koncentrací na elementu blízkém úložišti 19657 v čase 5000let	51

Úvod

Problematika ukládání radioaktivních odpadů je v dnešní době velmi aktuální. Touto problematikou se například v České republice zabývá Správa úložišť radioaktivních odpadů [1]. Radioaktivních prvků se využívá především v energetice jako paliva do jaderných reaktorů, ale ve velké míře také v medicíně. Již využitý materiál je však stále vysoce radioaktivní a tedy pro zdraví a životní prostředí nebezpečný. Je tedy nutné jej bezpečně uložit do doby, než bude pro život nezávadný, nebo jej nedokážeme opětovně využít. Předpokládá se, že radioaktivní materiály se zapouzdřené budou ukládat do horninových masivů, které vykazují vysokou celistvost. Horniny, z nichž je masiv složen, jsou charakterizovány mimořádně nízkou hydraulickou vodivostí. Vlastnosti masivu se získávají geologickým průzkumem. Ten však nedokáže zaručit přesné popsání vlastností celého masivu o velikosti 60 km². Je tedy nutné provést citlivostní analýzu získaných vlastností a s novými vlastnostmi provést testy, abychom získaly obraz, ukazující jaké změny mohou nastat v šíření látky v případě odchýlení vstupních dat získaných geology od skutečnosti.

Cílem bakalářské práce je provést citlivostní analýzu vstupních parametru pro oblast melechovského masivu. Citlivostní analýza bude prováděna pro hydraulické vodivosti hornin a puklin.

Teoretická část obecně pojednává o oblasti melechovského masivu. Je v ní popsána struktura masivu z geologického hlediska, ale také jakým způsobem byla geologická data zpracována do formy geometrické a výpočetní sítě. Z geologického popisu byly získány informace o horninách a puklinách, které se v masivu nacházejí [2]. Geometrická a výpočetní síť se snaží tuto horninovou strukturu co nejvěrněji popsat formou, která je vhodná pro matematicko-fyzikální modelování. Na získané výpočetní síti posléze provádíme výpočetní simulace.

V kapitole „Základní příklad“, se zabýváme samotným výpočtem, který provádíme na datech získaných od geologů. K výpočtu využíváme program Flow123D. Popisujeme zde postup výpočtu od možností nastavení až po zobrazení výstupních dat. V této části také získáme informace o struktuře vstupních a výstupních soubor, které budeme využívat pro citlivostní analýzu. Strukturu vstupních a výstupních souborů je třeba znát,

abychom dokázali najít vstupní data, která chceme v rámci citlivostní analýzy měnit a abychom výstupní data dokázali správně interpretovat.

V praktické části se zabýváme přímo citlivostní analýzou, která je založena na metodě Monte Carlo. Zabýváme se způsobem generování nových vstupních dat a jejich popisem pomocí statistických rozdělení. Pojednáváme zde o možnostech zobrazení výstupních dat. Také popisujeme, jak výstupní data zpracovat aby je bylo možné zobrazit formou pravděpodobnostních grafů. Závěrem kapitoly zobrazujeme výsledky citlivostní analýzy ve formě pravděpodobnostních grafů s jejich následným vysvětlením.

Teorie

1 Popis oblasti

Cílem této části práce je vytvořit model, který by umožňoval výpočet variantních scénářů vývoje migrace kontaminantů v poli vzdálených interakcí hlubinného úložiště v hypotetické oblasti, s vlastnostmi charakteristickými pro prostředí českých žulových masivů. Model je stavěn především na datech, která jsou získána s využitím geografických, geologických a hydrogeologických informací zaznamenaných v GIS oblasti Melechov (viz 1.3) a s využitím dostupných dat z dalších lokalit (Potůčky-Podlesí, zásobník plynu Příbram). V oblasti Potůčky-Podlesí jsou delší dobu sledovány hodnoty hydraulické vodivosti v povrchových vrstvách, zatímco zásobník plynu v Příbrami poskytuje dostatek informací o hodnotách hydraulické vodivosti v hlubších partiích.

Výpočetní síť modelu byly připravovány v části 1.3 a jsou vytvořeny tak, aby následně umožňovaly další modifikaci a generování dat pro různé varianty simulačních výpočtů. Ty se budou lišit strukturou a dosahem systému hydrogeologicky významných zlomů. V tomto ohledu byla GIS data doplněna o vrstvu „hypotetických puklin“. Tyto hypotetické pukliny v dříve prozkoumaných částech zájmové oblasti sledují zlomy, u kterých se předpokládá významná souvislost s hydrogeologií v oblasti. [3]

1.1 Koncepce modelu

Struktura hypotetické oblasti melechovského masivu byla stanovena na základě dostupných strukturních dat popisující geologickou stavbu sledované oblasti (viz Obrázek 1). Ve zprávě [2] byla vymezena celková hranice oblasti (asi 60 km²), hydrogeologicky významné zlomy a geologická stavba horniny a puklin v závislosti na hloubce.

Geologický model oblasti, zlomů a stavby hornin a puklin závislých na hloubce oblasti vycházel především z následujících poznatků [1]:

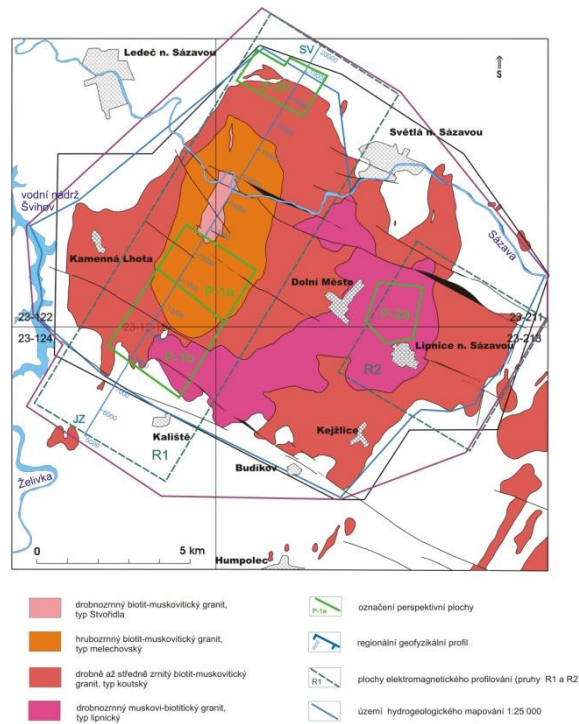
- Hranice oblasti jsou vyznačeny zelenými liniemi na Obrázek 1 a sledují místní rozvodnice popřípadě významné toky vyskytující se v oblasti.
- Hydrogeologicky významné zlomy, které jsou vyznačeny černě, jsou identifikovány v oblasti na základě dřívějších výzkumů a jsou doplněny

o hypotetické struktury, které jsou označeny oranžově. Tyto struktury rozšiřují systém puklin o doposud méně zkoumané části oblasti.

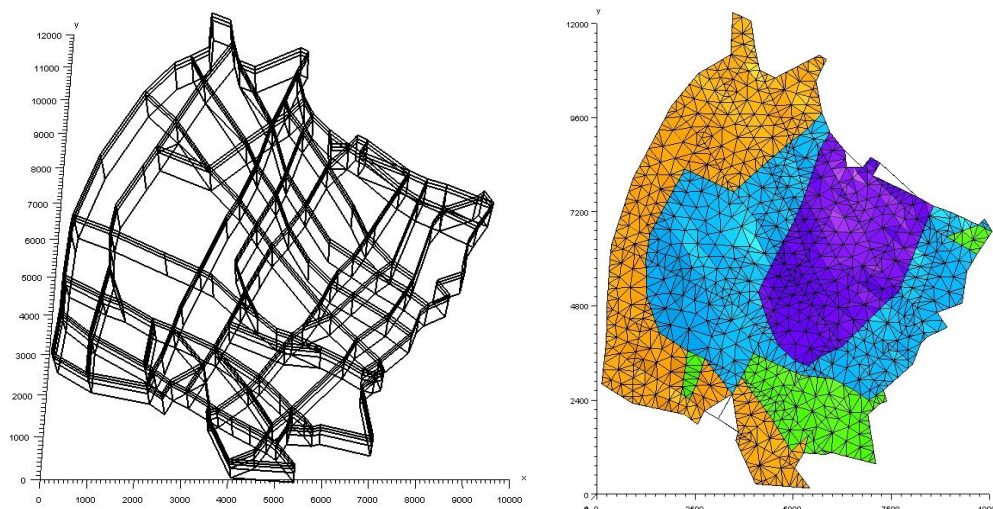
- Geologická struktura ve 3D byla vytvořena na základě znalosti povrchu oblasti.
- Model byl připravován pro saturovanou část horninového masivu do hloubky -600 m n. m. (hloubka 1000 – 1300 m). Hydraulické vodivosti hornin byly stanoveny na základě údajů publikovaných ve zprávě [2]. Ve zprávě [4] jsou uvedeny základní charakteristiky hydrologických a meteorologických poměrů pro oblast melechovského masivu.

1.2 Geometrie oblasti

V souladu s vymezenou zájmovou oblastí s využitím podkladů strukturního geologa byla připravena geometrie simulované oblasti. Výsledná geometrie respektuje rozhraní hornin v oblasti, obsahuje dvě struktury horizontálních zlomů a úplnou referenční síť vertikálních tektonických prvků, viz Obrázek 1 a 2. [3]



Obrázek 1 - Geologická struktura oblasti melechovského masivu. [3]

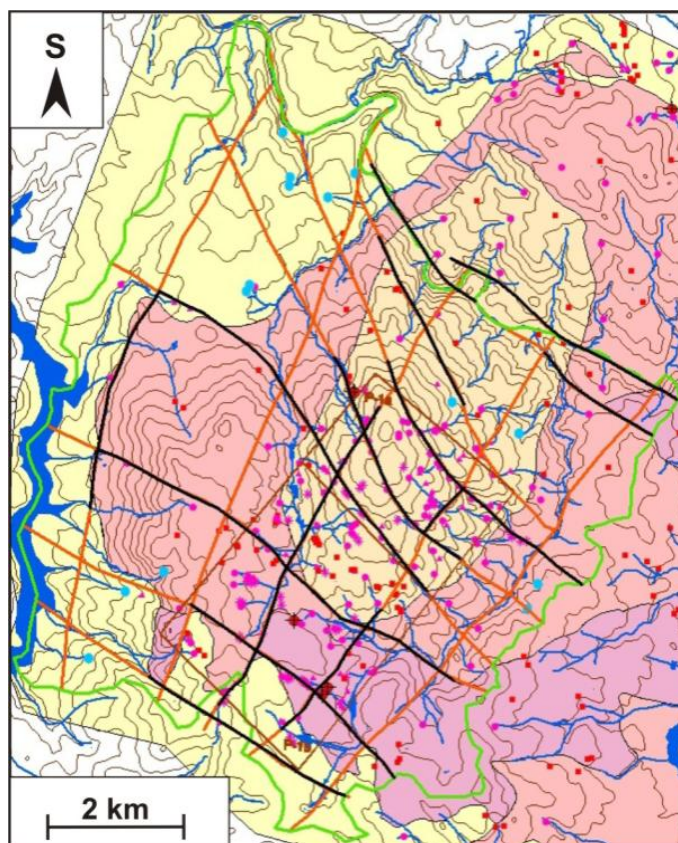


Obrázek 2 - Vizualizace připravené geometrie a výpočetní sítě modelu v programu GMSH. [3]

1.3 Výpočetní síť

Na vytvořené geometrii byla generována síť, která má následující vlastnosti [3]:

- Síť MM obsahuje jeden horizontální zlom a vertikální zlomy dle referenční sítě tektonických prvků (viz oranžové a černé linie na Obrázek 3).
- Síť byla generována s charakteristickou délkou strany elementu 300 m.
- Síť obsahuje 7174 uzlů, z nichž je vytvořeno 2797 2D elementů a 34271 3D elementů. Obsahuje tedy celkem 37068 elementů.
- Na uvedené síti je realizován testovací výpočet pro vstupní parametry uvedených ve zprávě [3]. V rámci bakalářské práce byla na této síti provedena citlivostní analýza vstupních parametrů modelu.



Obrázek 3 - Podklady pro přípravu matematického modelu pro oblast melechovského masivu. Zelená linie – vymezení simulované oblasti, oranžové linie – referenční síť tektonických zlomů, černé linie – tektonické prvky s ověřenou nebo předpokládanou hydrogeologickou funkcí. [2]

2 Popis vstupů do modelu

Vstupy do modelu jsou převzaty ze zprávy [3]. S těmito vstupy bude provedena základní úloha, kterou budeme následně rozšiřovat.

2.1 Fyzikální vlastnosti prostředí

Při vytváření jednotlivých typů horniny pro přiřazení fyzikálních vlastností prostředí (hydraulické vodivosti) bylo rozlišeno [3]:

- O jakou geologickou strukturu se jedná (porézní masiv nebo zlomová zóna),
- o jakou horninu se jedná (granit melechovského typu, granit koutského typu, granit typu Lipnice, pararuly),
- dále bylo uvažováno hloubkové rozlišení (hloubka do 75, 150, 400, 600, 800, 800 a více metrů).

Pro simulační výpočty byla připravena sada dat hydraulických vodivostí (označená HV), konkrétní hodnoty uvádí Tabulka 1. Okrajové podmínky a hydraulické vodivosti v jednotlivých částech simulovaného masivu byly kalibrovány tak, aby:

- Piezometrická výška v horní vrstvě modelované oblasti vyjadřovala úroveň hladiny podzemních vod sledující přibližně povrch oblasti,
- bylo dosaženo zhruba 1% infiltrace vody do hlubšího oběhu z celkového srážkového úhrnu.

Tabulka 1 - Hydraulické vodivosti datové sady HV. [3]

Datová sada hydraulických vodivostí – HV, hodnoty v [m/rok]				
Hornina objemy				
Hloubka do	Melechovský typ	Koutský typ	Lipnický typ	Ruly
75	18,0 – 9117	5,4 – 9112	1,8 – 9107	0,36 – 9100
150	2,88 – 9217	0,86 – 9212	0,288 – 9207	0,0576 – 9200
400	0,288 – 9317	0,043 – 9312	0,0288 – 9307	0,00576 – 9300
600	0,0288 – 9417	0,0086 – 9412	0,0029 – 9407	0,00036 – 9400
800	0,0054 – 9517	0,0015 – 9512	0,00054 – 9507	0,000072 – 9500
více než 800 m	0,0011 – 9617	0,00032 – 9612	0,00012 – 9607	0,000012 – 9600
Pukliny vertikální				
Hloubka do	Bez rozlišení horniny			
75	14,4 – 4100			
150	7,2 – 4200			
400	7,2 – 4300			
600	3,6 – 4400			
800	1,8 – 4500			
více než 800 m	0,72 – 4600			
Pukliny horizontální				
Hloubka	Melechovský typ	Koutský typ	Lipnický typ	Ruly
150	72,0 – 2200	36,0 – 2207	36,0 – 2212	18,0 – 2217

2.2 Okrajové podmínky proudění

Pro zadávání okrajové podmínky byly rozlišeny tři základní části okrajových stěn simulované oblasti [3]:

- Okrajové stěny tvořící horní okraj (povrch simulované oblasti),
- okrajové stěny tvořící dolní okraj a
- okrajové stěny tvořící boční okraje celé oblasti.

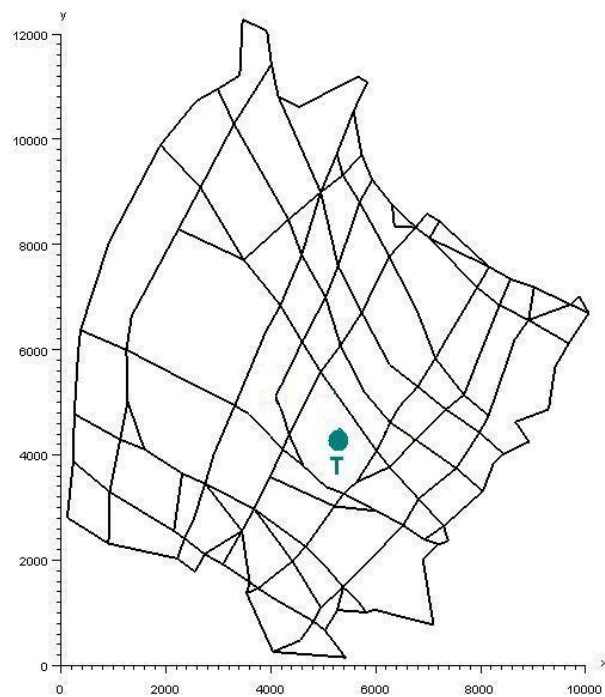
2.3 Okrajové a počáteční podmínky transportu

Zdroj kontaminace (radionuklidů) pro výpočet transportní úlohy je v modelu realizován okrajovou podmínkou transportu. Pro řešení konkrétní varianty transportu byl vybrán element v požadovaném místě zdrojového členu, tento element byl ze sítě následně odstraněn. Nulová koncentrace byla zadávána na okrajových stěnách odstraněného elementu, v jehož místě byl lokalizován zdrojový člen. Zadávaná koncentrace na příslušných stěnách je 100, tato hodnota představuje 100 % koncentrace kontaminantu v místě průniku do geosféry. Vypočtené hodnoty koncentrace v jednotlivých místech sítě potom představují procentuální podíl maximální koncentrace. [3]

V celé oblasti je uvažována nulová počáteční koncentrace kontaminující látky. [3]

2.4 Varianta výpočtu transportu

Model hlubinného úložiště (zdroj kontaminace) představuje jeden element, který je následně vyjmut ze sítě. Pro modelování proudění a transportu kontaminace byl zvolen zdrojový element č. 19 817, který má souřadnice vrcholů v metrech [5961, 4351, -357]; [5989, 4351, -89]; [5997, 4615, -35]; [6148, 4350, -89]. Element se vyskytuje v blízkosti pukliny. Okrajová podmínka koncentrace kontaminující látky je poté vkládána na stěny odstraněného elementu.



Obrázek 4 - Vybraná pozice zdrojového členu. [3]

Pro zdrojový člen (hlubinné úložiště) bylo vybráno umístění v centrální části simulovaného masivu v hloubce -100 m n m. Uvažovaná pozice je na Obrázek 4 označena písmenem T. [3]

3 Typy citlivostních analýz

Citlivostní analýza vstupních parametrů hlubinného úložiště radioaktivních odpadů je jedním ze vstupů pro analýzu rizik spojených s úložištěm. Provádí se proto, že vstupní parametry nemusí přesně odpovídat skutečnosti. V citlivostní analýze měníme vstupní parametry v určitém spektru kolem střední hodnoty, kterou je pro nás soubor dat získaných od geologů, čímž popíšeme možné odchylky od reálné situace. Po provedení simulací získáme sadu výstupů, ze kterých vyčteme míru průniku látky na povrch, při různých vstupních hodnotách hydraulických vodivostí hornin a puklin.

V oblasti řešení citlivostních úloh lze tyto úlohy rozdělit do dvou základních typů. První typ úloh je založen na výpočtu minimální a maximální hodnoty neznámých parametrů. U druhého typu se měnící se parametry generují stochasticky.

U prvního typu úloh se nejprve provede výpočet pro střední hodnotu měněného parametru a následně pro předpokládanou minimální a maximální hodnotu sledovaného parametru. Jestliže měníme více parametrů, potom minimální a maximální hodnota je zvolena pro každý z nich. Celkem je potřebné realizovat $2n+1$ výpočtů, kde n značí počet měnících se parametrů. Výstupem z programu Flow123D je $2n+1$ sad výstupních hodnot, které lze vzájemně porovnat a které lze vizualizovat pomocí softwaru GMSH(7). Tento postup má výhodu v rychlosti provedení citlivostní analýzy, kdy je předem znám počet výpočtů a jednoduché interpretaci výsledků. Nevýhoda spočívá především v tom, že není zohledněn pravděpodobnostní charakter vstupních parametrů. Obvykle lze předpokládat, že skutečná hodnota vstupního parametru (pokud ji lze interpretovat na větší oblasti jednou hodnotou) bude spíše blízká střední hodnotě, než minimální nebo maximální. Pomocí této metody nelze určit pravděpodobnost nežádoucí události. Protože míra pravděpodobnosti je jeden ze vstupů pro určení celkového rizika, není tento postup obecně doporučován pro analýzu rizik.

U druhého typu analýzy se zohledňuje pravděpodobnostní charakter vstupních parametrů. U sledovaného vstupního parametru se zvolí statistické rozdělení, o kterém se předpokládá, že dostatečně vhodně charakterizuje příslušnou vstupní veličinu. Například hodnotu koeficientu tenzoru hydraulické vodivosti lze popsat pomocí logaritmicko normálního rozdělení. Následně se určí charakteristické parametry daného rozdělení – střední hodnota, rozptyl nebo další popisné parametry. Pomocí generátoru náhodných čísel jsou určeny konkrétní hodnoty vstupních parametrů. Dále se metodou

Monte Carlo získávají z měnících se vstupních hodnot výstupní realizace náhodného pokusu. Postupným vyhodnocením výstupních sad realizovaných simulací lze získat hypotetickou distribuční funkci určitého výstupního parametru, například distribuční funkci přetoku přes určitou část hranice oblasti nebo míru koncentrace na významném elementu v určitém čase. Výsledkem řešení citlivostní úlohy je potom distribuční funkce. Výhoda tohoto postupu spočívá především v tom, že lze relativně přesně popsat pomocí pravděpodobnostního přístupu výstupní hodnoty. Jeho nevýhoda spočívá v delší časové náročnosti z důvodu nutnosti provedení velkého množství realizací a horší interpretovatelnosti výsledků. Nelze opomenout ani mnohem náročnější požadavky na objem uložených dat v počítači. [5]

Základní příklad

4 Výpočetní program Flow123D

Flow123D je simulační software postaven na Borland C++ Builder 6.0. Umožňuje řešit proudění podzemních vod v heterogenních prostředích, transport rozpuštěných látek a jejich interakci s prostředím. Přičemž vstupem jsou informace o geologické struktuře oblasti, materiálech, hraničních podmínkách a sousednostech.

Výpočet je založen na smíšené hybridní metodě konečných prvků. Úlohy se dají řešit se stacionárním prouděním, nestacionárním prouděním a proměnnou hustotou proudění. Výpočet je možné provést na tzv. kompatibilních a nekompatibilních diskretizačních sítích.

Transport rozpuštěných látek se provádí pomocí rozkladu operátoru. Mobilní a imobilní výměna mezi puklinami je matematicky řešena s použitím analytických řešení a nelineární absorpce je řešena numericky. [6]

5 Soubory se vstupními daty

Vstupem do programu Flow123D jsou informace o geologické struktuře oblasti, materiálech, okrajových a počátečních podmínkách a sousednostech. Jsou uložena v několika textových souborech s příponami btc, ngh, mtr, msh, ict, bct, bcd (viz níže). Dále je pro výpočet nutný soubor s příponou ini (5.2) který obsahuje nastavení.

Soubory se vstupními daty pro výpočty jsou [6]:

- soubor sítě – *.msh
- soubor materiálů – *.mtr
- soubor sousedností – *.ngh
- okrajové podmínky proudění – *.bcd
- okrajové podmínky transportu – *.tbc
- počáteční podmínky proudění – *.fic
- počáteční podmínky transportu – *.tic

Soubor s nastavením pro výpočet:

- soubor nastavení - *.ini

V rámci citlivostní analýzy budeme pracovat se vstupním souborem obsahující informace o materiálech mm.mtr (5.1), konkrétně s částí obsahující hydraulické vodivosti hornin a puklin, které budeme měnit. Dále se souborem nastavení flow_t.ini (5.2).

5.1 Vstupní soubor materiálů „mm.mtr“

Vstupní soubor „mm.mtr“ obsahuje informace o vlastnostech materiálů v oblasti.

Soubor obsahuje části:

- MaterialFormat (neměněno)
- Materials (měněné parametry)
- Storativity (neměněno)
- Geometry (neměněno)
- Sormption (neměněno)
- SorptionFraction (neměněno)
- DualPorosity (neměněno)

Na Obrázek 5 vidíme Vstupní soubor „mm.mtr“ ze kterého byly odstraněny vstupní data. Vidíme tedy jeho strukturu. Data, která budeme v rámci citlivostní analýzy měnit, se nacházejí v části *Materials*. Jedná se o hodnoty hydraulických vodivostí materiálů. Hydraulická vodivost je v jednotkách [m/rok]. Udává tedy o kolik metrů prostoupí látka popsaným materiálem za rok.

Formát části *Materials* souboru „mm.mtr“ :

```
$Materials
number-of-materials
material-number material-type <material-type-speci_c-data> [text]
...
$EndMaterials
```

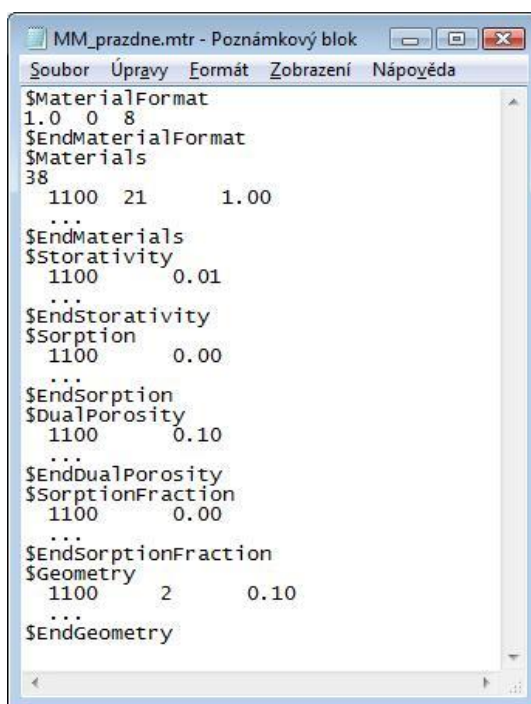
Kde:

number-of-materials – Počet druhů materiálů a puklin v oblasti s odlišnými vlastnostmi.

material-number – Index materiálu nebo pukliny.

material-type – Typ puklina nebo hornina. (21 – puklina, 31 - hornina)

material-type-speci_c-data – Hydraulická vodivost v metrech za rok [m/rok].



Obrázek 5 - Vstupní soubor mm.mtr bez vstupních hodnot.

Kompletní formát vstupního souboru „mm.mtr“ viz příloha 1.

5.2 Soubor nastavení flow_t.ini

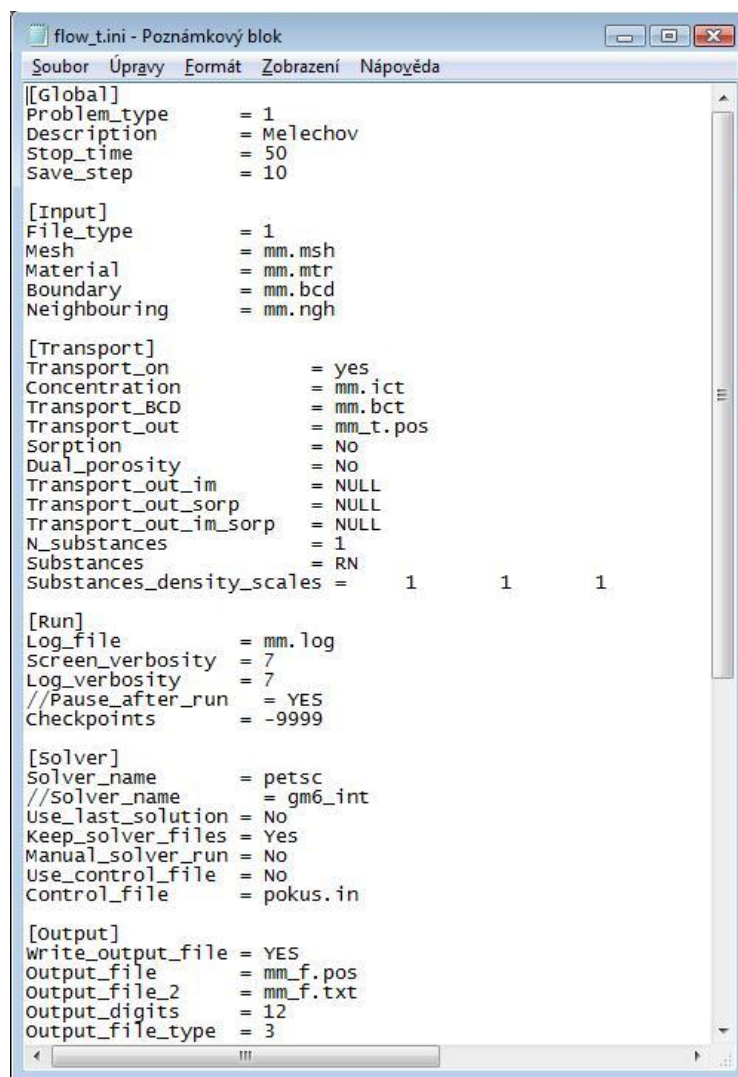
Soubor nastavení „flow_t.ini“ je rozdělen do několika částí (Obrázek 6)

- [Global] (neměněno)
- [Input] (měněno)
- [Transport] (neměněno)
- [Run] (neměněno)
- [Output] (neměněno)
- [Constants] (neměněno)

Jednotlivé části obsahují parametry [6]:

- [Global]
 - *Description* - Popis úlohy.
 - *Stop_time* – Parametr určující kolik stovek let simulace trvá v reálném čase. Je-li hodnota nastavena na 50, tak simulace vyjadřuje děj trvající v reálném čase 5000 let.
 - *Save_step* - Určuje počet uložení výstupních dat v průběhu výpočtu. Je-li hodnota *Save_step* nastavena na 10 a simulace trvá v reálném čase 5000 let, tak program ukládá výstupní data každých $5000/10=500$ let. Program uloží počáteční stav čas 0 let a poté 500 let, 1000 let a tak dále až do hodnoty *Stop_time*. Máme tedy 11 výstupních sad dat rovnoměrně rozložených v intervalu 0 až 5000 let.
- [Input] - nastavení názvů vstupních souborů
 - *Mesh* – Soubor popisující geometrii oblasti (mm.msh).
 - *Material* – Soubor obsahující definice vlastností materiálů (mm.mtr):
 - ❖ Hydraulické vodivosti (měněné parametry)
 - ❖ Duální porozita (neměněno)
 - ❖ Rozevření puklin (neměněno)
 - ❖ Storativity (neměněno)
 - *Boundary* - Okrajové podmínky (mm.bcd).
 - *Neighbouring* – Soubor sousedností (mm.ngh).
- [Transport]
 - *Transport_out* - Název výstupního souboru pos (mm_t.pos). Do tohoto souboru se ukládají informace o pozicích jednotlivých elementů a především hodnoty koncentrací na elementech v průběhu času (výstupní data, která budeme dále zpracovávat).

- [Run]
 - *Log_file* – Název souboru log (mm.log).
Soubor, do kterého se ukládá výpis činností programu Flow123D a zda proběhly v pořádku.
- [Output] - Parametry a názvy dalších výstupních souborů.
- [Constants] - Obsahuje hodnoty konstant například gravitační konstanta $g=9.81$.



```

[Global]
Problem_type      = 1
Description        = Melechov
Stop_time         = 50
Save_step         = 10

[Input]
File_type         = 1
Mesh              = mm.msh
Material          = mm.mtr
Boundary          = mm.bcd
Neighbouring      = mm.ngh

[Transport]
Transport_on       = yes
Concentration      = mm.ict
Transport_BCD     = mm.bct
Transport_out      = mm.t.pos
Sorption          = No
Dual_porosity     = No
Transport_out_im   = NULL
Transport_out_sorp = NULL
Transport_out_im_sorp = NULL
N_substances      = 1
Substances        = RN
Substances_density_scales = 1 1 1

[Run]
Log_file          = mm.log
Screen_verbosity  = 7
Log_verbosity     = 7
//Pause_after_run = YES
Checkpoints       = -9999

[Solver]
Solver_name       = petsc
//Solver_name     = gm6_int
Use_last_solution = No
Keep_solver_files = Yes
Manual_solver_run = No
Use_control_file  = No
Control_file      = pokus.in

[Output]
write_output_file = YES
output_file       = mm.f.pos
output_file_2     = mm.f.txt
output_digits     = 12
output_file_type  = 3
  
```

Obrázek 6 - ukázka konfiguračního souboru flow_t.ini

6 Výstupní hodnoty koncentrací na elementech

Výpočet koncentrací látky v oblasti melechovského masivu spustíme souborem „flow.bat“. Výstupem ze simulace prováděné programem Flow123D (kapitola 4) je soubor proudění „mm_f.pos“ a soubor koncentrací „mm_t.pos“. Soubory je možné zobrazit pomocí programu GMSH (kapitola 7).

„mm_f.pos“:

Soubor s výstupy proudění. Tento soubor nebude využit pro následné citlivostní analýzy.

„mm_t.pos“:

Soubor „mm_t.pos“ je rozdělen do čtyř částí. Jeho struktura je vidět na Obrázek 7, který zobrazuje soubor bez uložených dat. Podrobnější struktura, viz příloha 2. Soubor „mm_t.pos“ obsahuje informace o elementech a uzlech v oblasti (např. souřadnice nebo tvar elementů). Dále obsahuje hodnoty koncentrací v průběhu času na jednotlivých elementech (data, která budeme dále zpracovávat). Hodnoty koncentrací a čas, ve který se na elementech nacházely, jsou uloženy ve čtvrté části souboru „mm_t.pos“ *\$ElementData*. Jednotlivé sady koncentrací se stejným časem, ve kterém se na elementech nacházely, budeme v rámci citlivostní analýzy dále zpracovávat do podoby pravděpodobnostních grafů.

Soubor je možné graficky zobrazit pomocí programu GMSH (kapitola 7).

Soubor „mm_t.pos“ je rozdělen do několika částí (Obrázek 7):

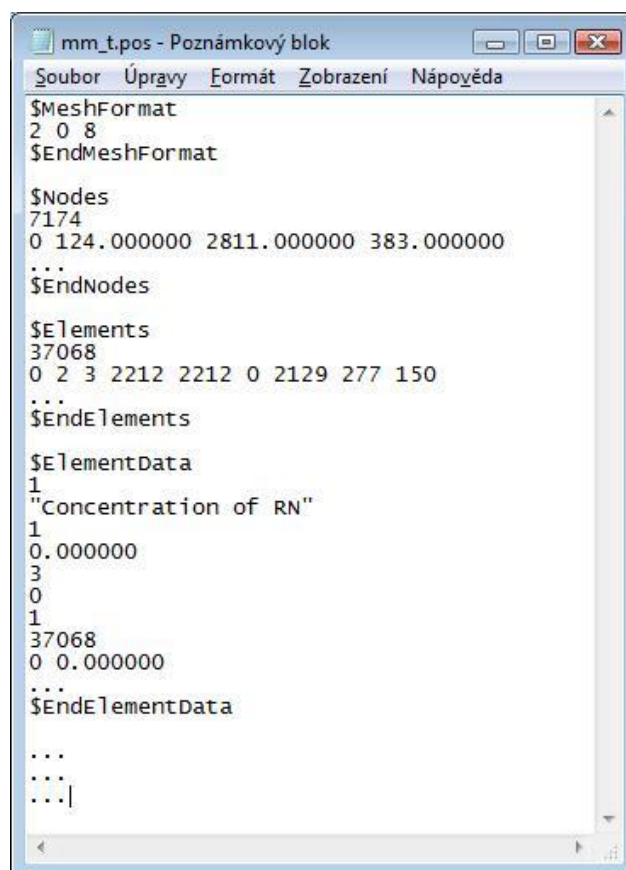
- **První část:**
Obsahuje informace o formátování souboru, použitých datových typech.
- **Druhá část:**
Obsahuje informace o počtu a souřadnicích uzlů v síti popisující oblast.
- **Třetí část:**
Obsahuje informace o elementech v síti. O jejich počtu tvaru a z jakých uzlů jsou složeny.
- **Čtvrtá část:**
Ve čtvrté části jsou sady koncentrací na jednotlivých elementech a čas, ze kterého sada pochází (data se kterými dále pracujeme).

\$ElementData
time

save-step-number
number-of-elements
elm-number concentration
 ...
 \$EndElementData

kde [6]:

- *time* – Čas simulace (stovky let), ve kterém proběhlo uložení.
- *save-step-number* – Informace o kolikáté uložení se jedná. (počet uložení, viz 5.2)
- *nuber-of-elements* – Počet elementů v oblasti.
- *elm-number* – Index aktuálního elementu.
- *concentration* – Koncentrace na aktuálním elementu.



```

mm_t.pos - Poznámkový blok
Soubor Úpravy Formát Zobrazení Nápověda

$MeshFormat
2 0 8
$EndMeshFormat

$Nodes
7174
0 124.000000 2811.000000 383.000000
...
$EndNodes

$Elements
37068
0 2 3 2212 2212 0 2129 277 150
...
$EndElements

$ElementData
1
"Concentration of RN"
1
0.000000
3
0
1
37068
0 0.000000
...
$EndElementData

...
...
...|
  
```

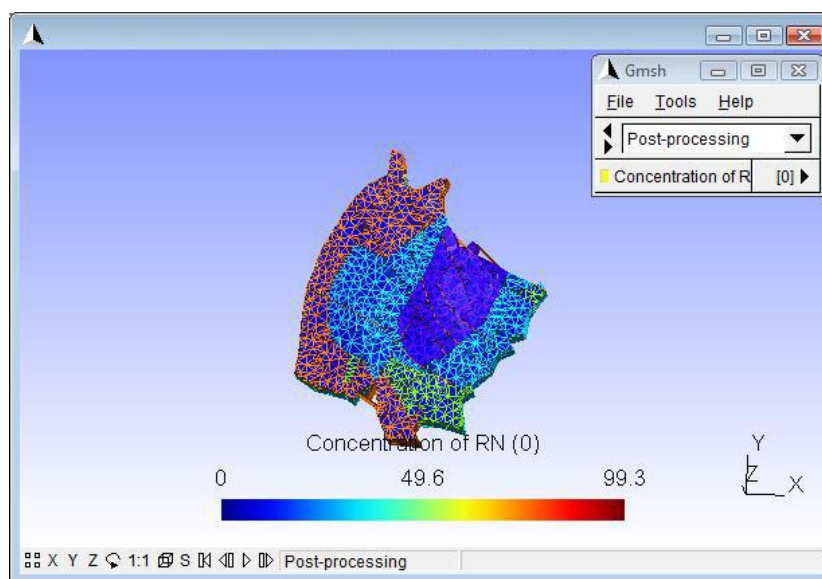
Obrázek 7 - Soubor "mm_t.pos" po odstranění dat

7 Vizualizace pomocí softwaru GMSH

Software GMSH je automatický třídimensionální generátor elementárních sítí s vestavěným pre- a post- processingem. Je navržen tak, aby poskytl jednoduchý nástroj pro řešení vědeckých úloh s použitím parametrických vstupů a pokročilou vizualizační schopností. Gmsh je postaven na čtyřech modulech: geometrie, sítě, výpočetním modulu a post-processingu. Všechny instrukce je možné zadat buď interaktivně s použitím GUI nebo pomocí textových souborů s využitím vlastního skriptovacího jazyka gmsh. [7]

7.1 Možnosti zobrazení pomocí softwaru GMSH

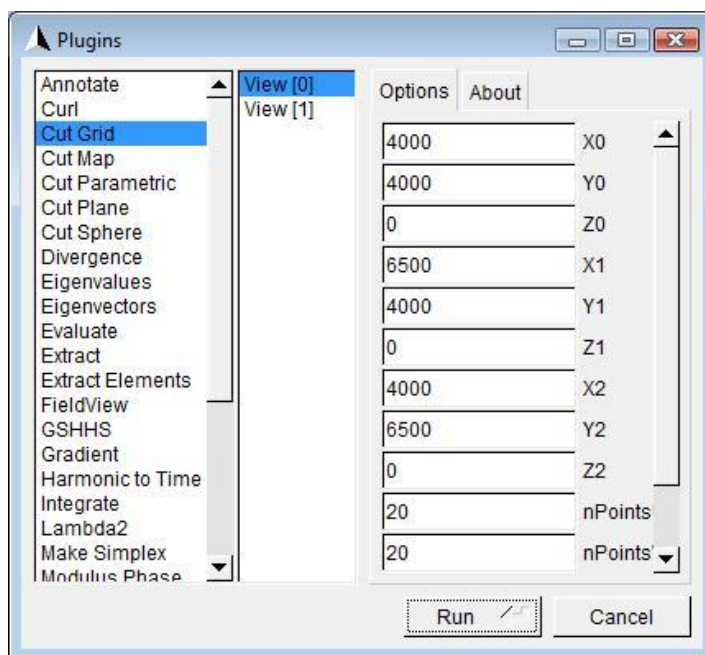
Otevřeme-li soubor „mm_t.pos“ v program GMSH, dokážeme graficky zobrazit rozšíření látky v prostředí. Můžeme také šipkami na klávesnici přepínat mezi sadami koncentrací od 0 do 5000 let po 500 letech a lze sledovat, jak prostupuje látka do okolního prostředí. Otevřeme-li, soubor „mm_t.pos“ pomocí softwaru GMSH a neprovedeme dalších nastavení, uvidíme pouze povrch melechovského masivu a postup vlny není možné sledovat, protože se šíří pod povrchem kam nevidíme (Obrázek 8).



Obrázek 8 - Povrch melechovského masivu zobrazený pomocí softwaru GMSH

Pro sledování hodnoty koncentrace v určité rovině se provede řez oblastí, abychom viděli jak se látka šíří. Řez provedeme v menu *Plugins-Cut Grid*. Dále nastavíme parametry roviny pomocí tří bodů, kudy chceme řez oblastí vést (viz Obrázek 9). Zvýšením hodnot u položek *nPoints* zvětšíme rozlišení řezu. Poté ještě v menu *Options-*

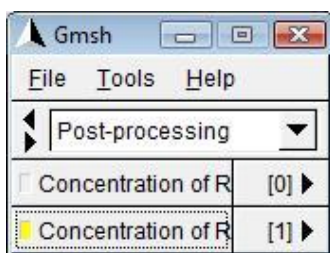
Mesh zrušíme označení *Surface edges* a *Volume edges*, aby síť popisující oblast nezakrývala vytvořený řez. Na řezu již můžeme sledovat jak se látka šíří pod povrchem.



Obrázek 9 - Nastavení řezu oblastí

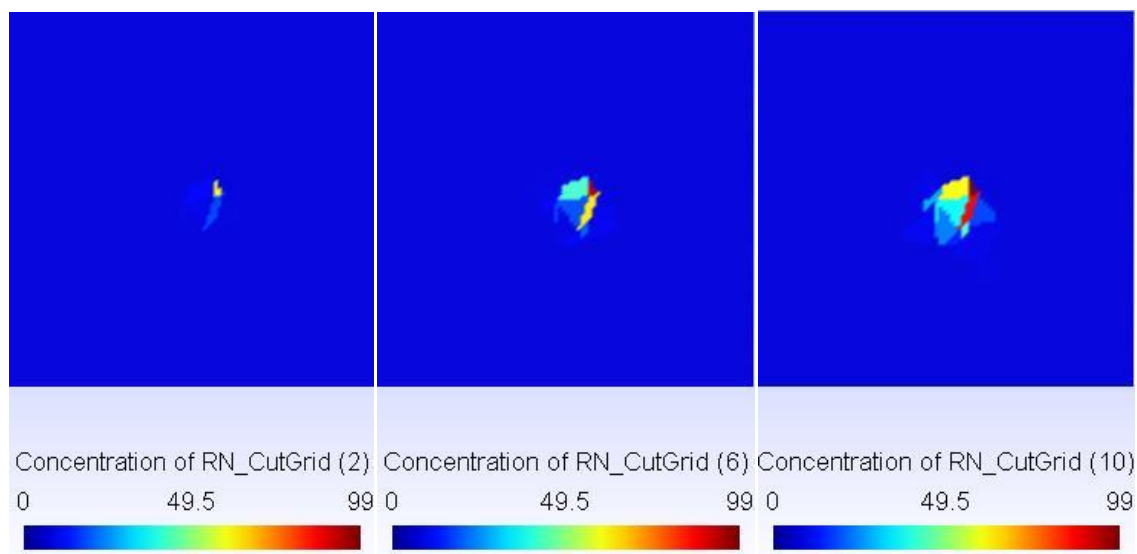
Nastavení na Obrázek 9 odpovídá vodorovnému řezu skrz oblast zdrojového členu, který je přibližně v jeho středu. Jak vidíme na „z“ hodnotách souřadnic v nastavení, řez je veden na hladině 0m.n.m. .

Po provedení nastavení označíme aktuální pohled *View[0]* a stiskneme tlačítko *Run*, čímž provedeme řez. V úvodním menu se nám zobrazí další možnost zobrazení, která představuje provedený řez. Původní zobrazení však stále překrývá provedený řez. V úvodním menu tedy zrušíme označení původního zobrazení a ponecháme označené pouze zobrazení řezu (Obrázek 10).



Obrázek 10 - Úvodní menu programu GMSH s označeným zobrazením řezu

Ted' již vidíme pouze provedený řez, na kterém můžeme sledovat šíření látky v průběhu času. Šipkami přepínáme mezi sadami hodnot koncentrací a vidíme jak se látka šíří. Pod obrázkem řezu se nachází nápis *Concentration of RN_CutGrid (x)* kde hodnoty x označuje, o kolikáté uložení se jedná. Pro naše nastavení (viz kapitola 5.2) x nabývá hodnot 0 až 10. Kde 0 je počáteční stav v čase 0let a každé zvýšení x o jedna představuje skok o 500let až do hodnoty 10 která reprezentuje čas 5000 let (Obrázek 11). Míru koncentrace můžeme odhadnout z barevného spektra pod řezem. Nulová koncentrace odpovídá tmavě modré barvě a se zvyšující se koncentrací se mění přes světle modrou, zelenou, žlutou až po červenou. Hodnoty přiřazené barvám závisí na tom, jaká je nastavena míra koncentrace v centru úložiště. V tomto případě je míra koncentrace v centru úložiště nastavena na hodnotu 100. Hodnoty tedy říkají, kolik látky se do konkrétního místa dostalo z maximální hodnoty 100. Jaké hodnoty se barvám přiřadí závisí také na tom, jaká maximální hodnota se v zobrazeném řezu nachází. Zobrazíme-li tedy pomocí řezu oblast, do které prostupuje maximální míra koncentrace 20, přiřadí se červené barvě hodnota 20.



Obrázek 11 - Graficky zobrazené šíření látky zobrazené pomocí programu GMSH pro časy 1000, 3000 a 5000 let, na nadmořské 0 m.n.m.

Citlivostní analýza vstupních parametrů

V části praxe se budeme zabývat vytvářením souborů „mm.mtr“ s novými hodnotami hydraulických vodivostí z logaritmicko-normálního rozdělení. Dále zpracováním výstupních dat, jejich popisem a vyhodnocením.

8 Statistika

Nové hodnoty hydraulických vodivostí získáváme z logaritmicko-normálního rozdělení (kapitola 8.1). Jednotlivé hodnoty nebudeme zvlášť popisovat zvoleným rozdělením, ale každou část (hydraulické vodivosti hornin, hydraulické vodivosti puklin) vynásobíme námi vygenerovaným číslem. Vygenerované číslo - parametr pochází z logaritmicko-normálního rozdělení. Do generátoru logaritmicko-normálního rozdělení jsme zadali střední hodnotu 0 a směrodatnou odchylku 1,4. Což odpovídá tomu, že 90 % hodnot je z intervalu od 0,1 do 10. Vysvětlení je uvedeno v kapitole 8.2. Po vynásobení jednotlivých částí vytvoříme nový vstupní soubor mm.mtr.

8.1 Logaritmicko normální rozdělení

Jestliže má náhodná veličina Y , $Y = \ln X$, normální rozdělení s danými parametry, pak náhodná veličina X má *logaritmicko-normální rozdělení* se stejnými parametry. Logaritmicko-normální rozdělení nachází uplatnění při popisu náhodných veličin nabývajících pouze kladných hodnot zejména v případech, kdy hustota pravděpodobnosti je asymetrická. Dále lze využít pro popis náhodných veličin, které mají rozptyl v řádových hodnotách. Využívá se faktu, že logaritmus náhodné veličiny splňuje normální rozdělení. Logaritmicko-normální rozdělení lze v modelech hlubinného úložiště využít například pro modelování hydraulických vodivostí horninové matrice, puklin nebo duální porozity. [5] [8]

Charakteristické vlastnosti logaritmicko-normálního rozdělení:

- Hustota pravděpodobnosti

$$f(x) = \frac{1}{\sigma x \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2}} \quad x, \sigma > 0$$

$$f(x) = 0 \quad x \leq 0$$

- Střední hodnota a rozptyl

$$E(X) = e^{\left(\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right)} \quad D(X) = e^{(2\mu + \sigma^2)}(e^{\sigma^2} - 1)$$

8.2 Výpočet směrodatné odchylky

Při generování nových hodnot hydraulických vodivostí, budeme násobit vstupní hodnoty získané geology vygenerovanými hodnotami. Chceme, aby 90 % hodnot bylo v intervalu 0,1 až 10 se střední hodnotou 1. Hodnoty budou generovány z logaritmicko-normálního rozdělení, které má dva parametry μ , σ .

Software Microsoft Excel umožňuje generovat náhodné čísla z logaritmicko-normálního rozdělení za předpokladu, že jsou zadány parametry μ , σ . Generování čísel se provádí pomocí generátoru náhodných čísel, která představují pravděpodobnost v distribuční funkci a výsledkem je hodnota parametru. Protože se předpokládá, že 90 % dat bude v intervalu 0,1 až 10, je nutné vypočítat hodnotu parametru σ .

Následuje odvození pro výpočet tohoto parametru. Hustota pravděpodobnosti logaritmicko-normálního rozdělení je

$$f(x) = \frac{1}{\sigma x \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Jestliže se vstupní hodnoty parametrů splňující toto rozdělení zlogaritmují, obdržíme normální rozdělení se střední hodnotou μ a směrodatnou odchylkou σ . Jakékoliv normální rozdělení lze převést na normované normální rozdělení, které má střední hodnotu rovnu 0 a směrodatnou odchylku rovnu 1. Tato transformace je $N(0,1) = \frac{x-\mu}{\sigma}$. Jestliže jsou data z logaritmicko-normálního rozdělení, potom je příslušná transformace

$N(0,1) = \frac{\ln(x) - \ln(\mu)}{\sigma}$. Pravděpodobnosti $P=0,95$ odpovídá z normovaného normálního rozdělení hodnota 1,65. To znamená, že platí $1,65 = \frac{\ln(x) - \ln(\mu)}{\sigma}$. Dále $1,65 \cdot \sigma = \ln(x) - \ln(\mu)$. Za předpokladu, že 90 % dat má být v rozmezí $\langle 0,1; 10 \rangle$ lze psát také $1,65 \cdot \sigma = \ln(10) - \ln(1)$. A konečně lze vyjádřit, že $\sigma = \frac{\ln 10}{1,65} = 1,3955$.

Konstanta 1,3955 byla zadávána do softwaru Microsoft Excel jako hodnota parametru směrodatné odchylky σ . Pro potřebu výpočtu byla konstanta σ zaokrouhlena na hodnotu 1,4.

Výsledky byly ověřeny pomocí softwaru Matlab. [9]

9 Generování vstupů

Generování vstupů provádíme v programu Microsoft Excel za pomoci funkcí NÁHČÍSLO a pro získání hodnoty z logaritmicko-normálního rozdělení použijeme funkci LOGINV. Když před název funkce umístíme znak “ = “ a za ně do závorek parametry (viz níže), vrátí nám požadovanou hodnotu (=NÁHČÍSLO(*parametry*), =LOGINV(*parametry*)).

Parametry funkce LOGINV:

- *Prst* – pravděpodobnost odpovídající logaritmicko-normálnímu rozdělení
- *Střed_hodn* – střední hodnoty funkce $\ln(\mu)$
- *Sm_odch* – směrodatná odchylka funkce σ

Parametru *Prst* získáme pomocí funkce NÁHČÍSLO, která vrací náhodné číslo z intervalu 0 až 1. Jak je popsáno výše, *Střed_hodn* má hodnotu $\ln(1)=0$ a *Sm_odch* je rovna 1,4. Hodnotami, které nám vrací funkce LOGINV poté násobíme původní hydraulické vodivosti hornin a puklin. Tak získáme vstupní hodnoty pro jednu realizaci. Celkem bylo vytvořeno 100 realizací vstupních dat. Ty jsou však stále pouze v listu programu Excel. Abychom získaly vstupní textový soubor v potřebném formátu, importujeme jeden ze souborů do nového listu programu Excel. Při importování necháme soubor rozdělit do sloupců a jako oddělovač zvolíme tabulátor. Tím získáme šablonu (Obrázek 12), do které můžeme jednoduše vkládat celou novou sadu dat najednou. Šablonu s novými vstupními daty poté uložíme jako textový soubor typu MS-DOS (Obrázek 13). V nabídce jsou i další typy textových souborů. Typ Macintosh a text v kódu Unicode, s těmi však výpočetní program Flow123D neumí pracovat. Takto postupně vytvoříme všech sto nových vstupních souborů.

	A	B	C
1	\$MaterialFormat		
2	1.0 0 8		
3	\$EndMaterialFormat		
4	\$Materials		
5	38		
6	1100	21	0.86252554
7	1107	21	0.86252554
8	1112	21	0.86252554
9	1117	21	0.86252554
10	2200	21	6210.18389
11	2207	21	3105.09194
12	2212	21	3105.09194
13	2217	21	1552.54597
14	4100	21	1242.03678
15	4200	21	621.018389
16	4300	21	621.018389
17	4400	21	310.509194
18	4500	21	155.254597
19	4600	21	62.1018389
20	9100	31	2.39386902
21	9200	31	0.38301904
22	9300	31	0.0383019
23	9400	31	0.00239387
24	9500	31	0.00047877
25	9600	31	7.9796E-05

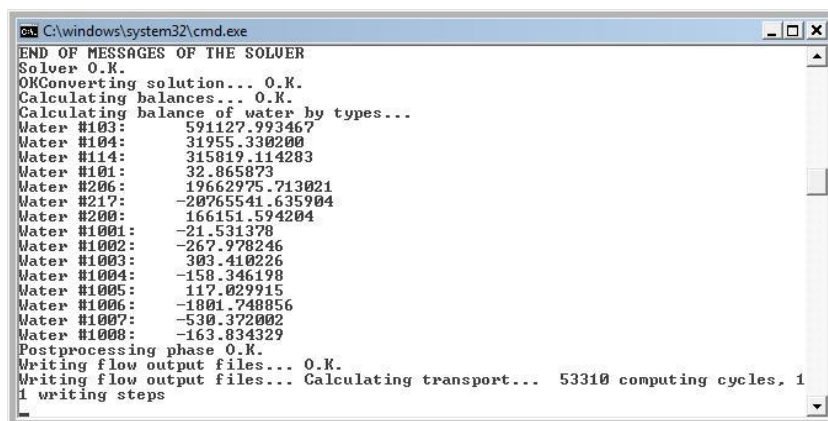
Obrázek 12 - část šablony s označenými novými daty

mm22.mtr - Poznámkový blok			
Soubor	Úpravy	Formát	Zobrazení
\$MaterialFormat			
1.0 0 8			
\$EndMaterialFormat			
\$Materials			
38			
1100	21	0.86252554	
1107	21	0.86252554	
1112	21	0.86252554	
1117	21	0.86252554	
2200	21	6210.18388	
2207	21	3105.09194	
2212	21	3105.09194	
2217	21	1552.54597	
4100	21	1242.03678	
4200	21	621.018388	
4300	21	621.018388	
4400	21	310.509194	
4500	21	155.254597	
4600	21	62.1018388	
9100	31	2.39386902	
9200	31	0.38301904	
9300	31	0.038301904	
9400	31	0.002393869	
9500	31	0.000478774	
9600	31	7.97956E-05	
9107	31	11.96934511	
9207	31	1.915095218	
9307	31	0.191509522	
9407	31	0.019150952	
9507	31	0.003590804	
9607	31	0.000797956	
9112	31	35.90803534	
9212	31	5.745285655	
9312	31	0.287264283	
9412	31	0.057452857	
9512	31	0.010173943	
9612	31	0.002154482	
9117	31	119.6934511	

Obrázek 13 - vstupní soubor mm.mtr s novými daty

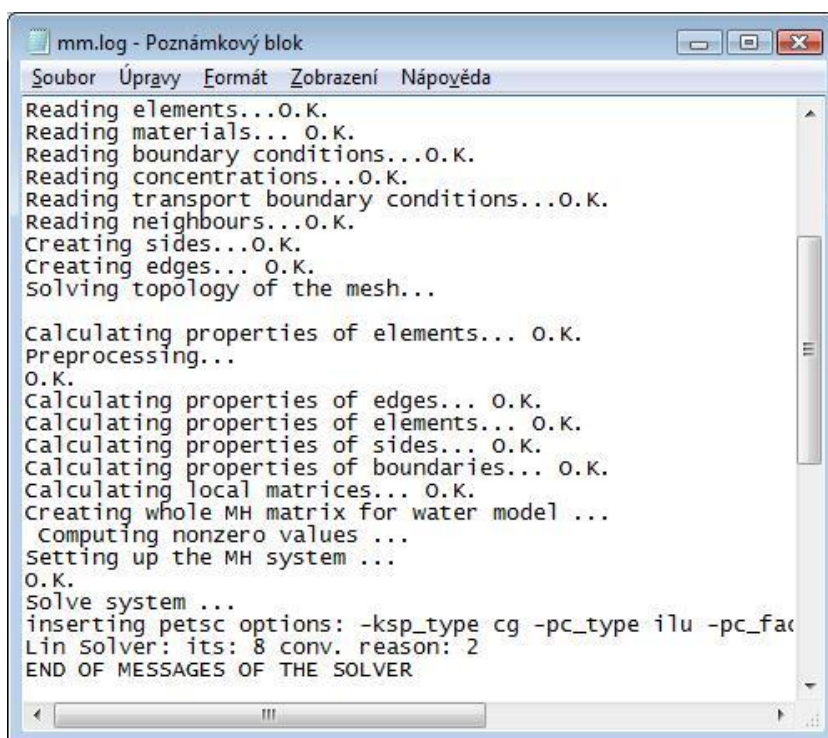
10 Výpočet

Jak je již zmíněno výše simulace se spustí spuštěním souboru flow.bat. Po spuštění se objeví dialogové okno (Obrázek 14) ve kterém se postupně zobrazují informace o průběhu výpočtu. V tomto okně jsou uvedeny poznámky o spouštění jednotlivých knihoven, a dále o hodnotách přetoků přes definované stěny (není využito v bakalářské práci) a následně o počtu iteračních kroků při výpočtu úlohy transportu. Po ukončení výpočtu se uloží poznámky do souboru mm.log (Obrázek 15).



```
C:\windows\system32\cmd.exe
END OF MESSAGES OF THE SOLVER
Solver 0.K.
ORConverting solution... 0.K.
Calculating balances... 0.K.
Calculating balance of water by types...
Water #103: 591127.993467
Water #104: 31955.330200
Water #114: 315819.114283
Water #101: 32.865873
Water #206: 19662975.713021
Water #217: -20765541.635904
Water #208: 166151.594204
Water #1001: -21.531370
Water #1002: -267.978246
Water #1003: 303.410226
Water #1004: -158.346198
Water #1005: 117.029915
Water #1006: -1801.748856
Water #1007: -530.372002
Water #1008: -163.834329
Postprocessing phase 0.K.
Writing flow output files... 0.K.
Writing flow output files... Calculating transport... 53310 computing cycles. 1
1 writing steps
```

Obrázek 14 - dialogové okno programu Flow123D



```
mm.log - Poznámkový blok
Soubor Úpravy Formát Zobrazení Nápověda
Reading elements...O.K.
Reading materials... O.K.
Reading boundary conditions...O.K.
Reading concentrations...O.K.
Reading transport boundary conditions...O.K.
Reading neighbours...O.K.
Creating sides...O.K.
Creating edges... O.K.
solving topology of the mesh...

calculating properties of elements... O.K.
Preprocessing...
O.K.
Calculating properties of edges... O.K.
Calculating properties of elements... O.K.
Calculating properties of sides... O.K.
Calculating properties of boundaries... O.K.
Calculating local matrices... O.K.
Creating whole MH matrix for water model ...
Computing nonzero values ...
Setting up the MH system ...
O.K.
Solve system ...
inserting petsc options: -ksp_type cg -pc_type ilu -pc_fac
Lin Solver: its: 8 conv. reason: 2
END OF MESSAGES OF THE SOLVER
```

Obrázek 15 - ukázka části souboru mm.log

Doby trvání simulací se od sebe značně liší. Záleží na hodnotách parametrů *Stop_time* a *Save_step* v konfiguračním souboru *flow_t.ini* (Obrázek 6), ale velký vliv mají také vstupní data jako velikost oblasti nebo hydraulické vodivosti hornin a puklin. V tomto případě, i přesto že parametry *Stop_time* a *Save_step* jsou pro všechny simulace stejné a mění se pouze hodnoty hydraulických vodivosti, tak se délka simulací pohybovala v rozsahu od několika minut až po několik hodin. Na počítači s procesorem AMD Athlon™ X2 DualCore QL-60 1.90 GHz trvala jedna simulace průměrně 45 minut, přičemž bylo možné mít spuštěny dvě simulace současně. Již v průběhu simulace jsou vytvořeny výstupní soubory *mm_t.pos* a *mm_f.pos*, do kterých se postupně ukládají data.

11 Výstupy z realizací

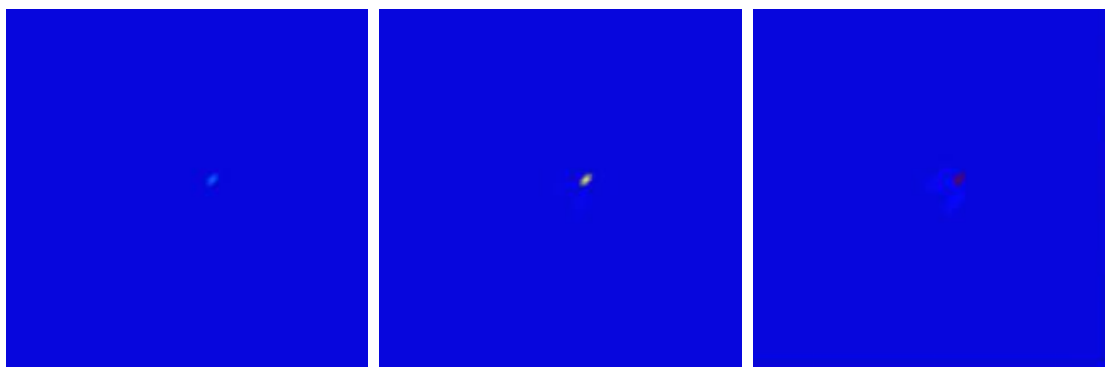
Výstupní soubory „mm_t.pos“ lze, jak je uvedeno výše, zobrazit pomocí programu GMSH (kapitola 7). Pro citlivostní analýzu je však vhodnější data dále zpracovat a zobrazit je formou pravděpodobnostních grafů. Z těch je možné vyčíst pravděpodobnost nežádoucí události.

11.1 Zobrazení výstupů pomocí softwaru GMSH

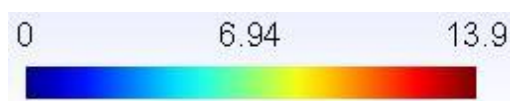
Zobrazíme-li jednotlivé soubory pomocí programu GMSH a provedeme řez podle nastavení v kapitole 7.1, můžeme vidět rozdíly v šíření látky pro různé hodnoty hydraulických vodivostí (Obrázek 16, Obrázek 18, Obrázek 20). Na Obrázek 17 ,Obrázek 19 aObrázek 21 zobrazujících barevné spektrum, můžeme také vidět, jaké hodnoty odpovídají zobrazeným barvám.

Šíření látky pro různé hodnoty hydraulických vodivostí:

- Grafické zobrazení šíření látky pro nízké hodnoty hydraulických vodivostí-

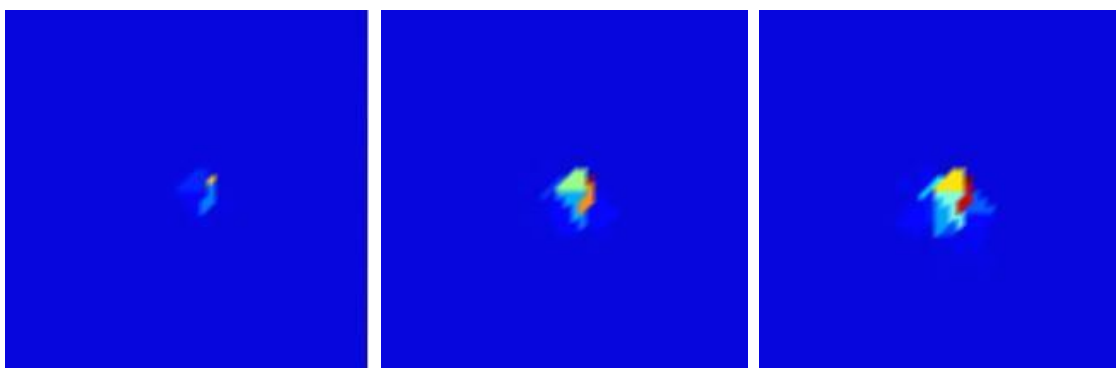


Obrázek 16 - Graficky zobrazené šíření látky pro nízké hodnoty hydraulických vodivostí zobrazené pomocí programu GMSH pro časy 1000, 3000 a 5000 let, , na nadmořské 0 m.n.m.

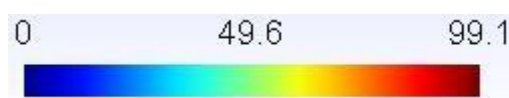


Obrázek 17 - Barevné spektrum koncentrace a barvám odpovídající hodnoty pro nízké hodnoty hydraulických vodivostí

- Zobrazení pro střední hodnoty hydraulických vodivostí-

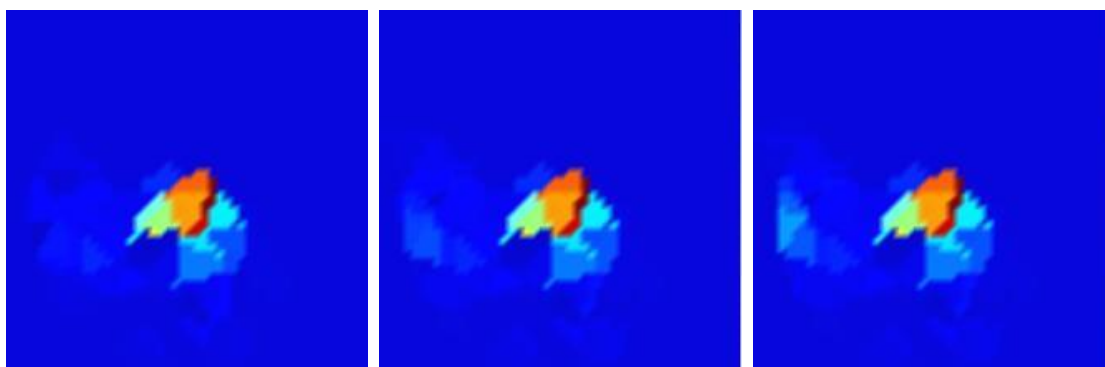


Obrázek 18 - Graficky zobrazené šíření látky pro střední hodnoty hydraulických vodivostí zobrazené pomocí programu GMSH pro časy 1000, 3000 a 5000 let, , na nadmořské 0 m.n.m.

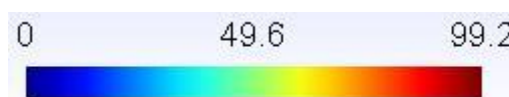


Obrázek 19 - Barevné spektrum koncentrace a barvám odpovídající hodnoty pro střední hodnoty hydraulických vodivostí

- Zobrazení pro vysoké hodnoty hydraulických vodivostí-



Obrázek 20 - Graficky zobrazené šíření látky pro vysoké hodnoty hydraulických vodivostí zobrazené pomocí programu GMSH pro časy 1000, 3000 a 5000 let, , na nadmořské 0 m.n.m.



Obrázek 21 - Barevné spektrum koncentrace a barvám odpovídající hodnoty pro vysoké hodnoty hydraulických vodivostí

Z grafického zobrazení lze získat obecné povědomí jak se látka šíří, ale přesnější informace jako hodnotu koncentrace v daný čas na konkrétním elementu nezískáme.

Také dokážeme zobrazit vždy jen jeden soubor. Abychom získali informace o tom, jak se látka šíří, případně zda se dostává na povrch s různými hodnotami hydraulických vodivostí na vstupu, museli bychom otvírat všech sto výstupních souborů (získaných ze 100 náhodných realizací pomocí metody Monte Carlo) a provádět množství řezů, což by bylo časově velmi náročné a ani tak by výsledky nebyly příliš přesné. Proto pro získání pravděpodobnosti nežádoucí události např. průniku látky na povrch je vhodnější pracovat přímo s daty ve výstupních souborech a dále je zpracovat do formy pravděpodobnostních grafů. (viz dále)

11.2 Zpracování výstupů formou pravděpodobnostních grafů

Pro účely citlivostní analýzy je nejvhodnější zpracovat data do pravděpodobnostních grafů. Ty nám říkají, s jakou pravděpodobností může dojít k nežádoucí události. Např. s jakou pravděpodobností a kolik pronikne látky na povrch. Abychom získaly tyto údaje, zvolíme si element ze sítě popisující oblast, který leží na povrchu. Ve výstupním souboru máme 10 uložení koncentrací na elementech v časech 500 až 5000 let (kapitola 5.2). Ze všech sto výstupních souborů (získaných z jednotlivých realizací) ze stejného času uložení vezmeme hodnoty koncentrace na zvoleném elementu. To provedeme pro všechny časy uložení (500, 1000, 1500,... let). Tím získáme deset sad výstupních dat. Každá obsahuje sto hodnot koncentrací na zvoleném elementu ve shodném čase, ale s odlišnými vstupními daty. Získanou sadu koncentrací pro jednotlivé časy setřídíme podle velikosti od nejmenší po největší. Každé hodnotě koncentrace se přidělí hodnota pravděpodobnosti. Protože máme sto hodnot koncentrací tak máme sto intervalů a na každý připadá jedno procento pravděpodobnosti. Ale první a poslední interval je půlený. Proto první hodnotě přiřadíme pravděpodobnost 0,005 a každé další o jedno procento vyšší, tedy následující koncentrace bude mít pravděpodobnost 0,015 další 0,025 až po stou koncentraci, která bude mít pravděpodobnost 0,995.

Provádět toto ručně by bylo časově značně náročné, proto jsme vytvořili program, který získává hodnoty koncentrací zvoleného elementu v určený čas a ukládá je do listu programu Microsoft Excel. V tom provedeme zbylé úpravy jako setřídění dat podle velikosti a přiřazení hodnot pravděpodobností.

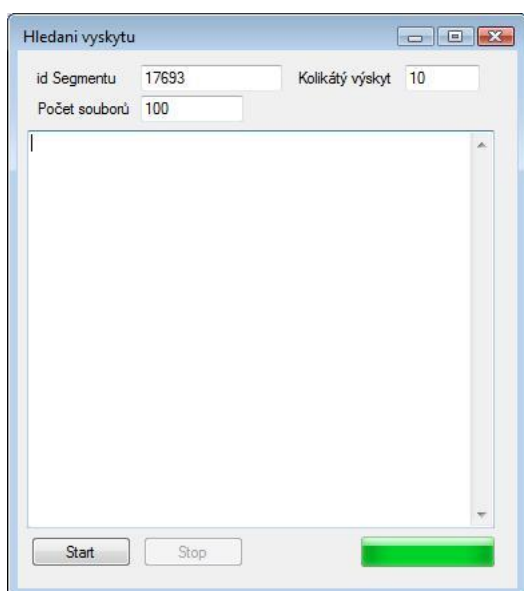
11.2.1 Program pro získávání hodnot koncentrací

Program je napsaný v jazyku C++. Jeho úkolem je vypsát hodnoty koncentrací ze všech souborů `mm_t.pos`, které mají shodný čas uložení. Jedná se pouze o pracovní verzi

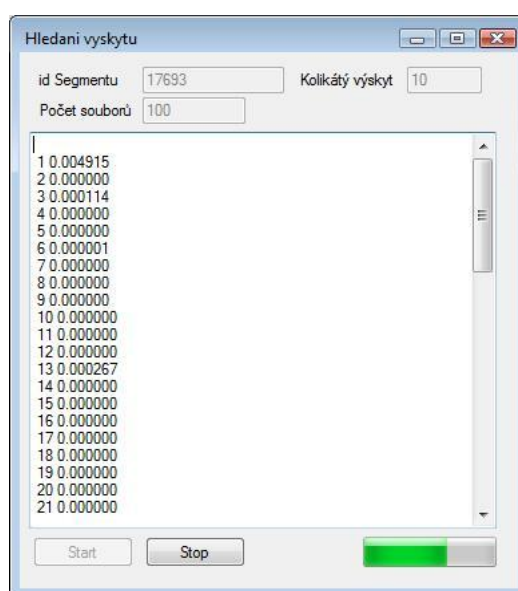
napsanou pro účely této bakalářské práce. Pokud by byl použit v jiných projektech, je třeba přesně znát formát souborů, ve kterých bude vyhledávat a případně program upravit, aby nedocházelo ke vracení chybných výsledků.

Před použitím musíme umístit spouštěcí soubor programu do stejné složky, ve které jsou umístěny výstupní soubory mm_t.pos. Soubory označíme číselnými indexy. Pro sto výstupních souborů jsou to indexy 1-100. Soubory se tedy budou jmenovat mm1_t.pos, mm2_t.pos až mm100_t.pos. Chceme-li soubory pojmenovat jinak, musíme zasáhnout přímo do kódu programu. Po spuštění souboru s příponou exe se otevře okno, do kterého vyplníme požadované údaje (Obrázek 22).

- *id Segmentu* – Index elementu, pro který hledáme hodnoty koncentrací
- *Kolikátý výskyt* – Odpovídá času, pro který koncentrace hledáme: Pod výskytem 1 jsou souřadnice elementu. Ve výskytu 2 jsou počáteční podmínky, tedy uložení v čase 0 let. Další výsky již odpovídají uložení v časech, které jsme nastavili (5.2). Pro naše nastavení odpovídá výskyt 3 času 500 let, výskyt 4 času 1000 let až po výskyt 12 odpovídající času 5000 let. To platí pro elementy s indexem vyšším než 7174. Hledáme-li element s indexem nižším než 7174 tak pod výskytem 1 jsou souřadnice uzlu. A dále obdobně jako výše, výskyt 2 souřadnic elementu, výskyt 3 počáteční podmínky, výskyt 4 čas 500 let až výskyt 13 odpovídající času 5000 let.
- *Počet souborů* – Index posledního prohledávaného souboru.



Obrázek 22 - Program pro vyhledávání a ukládání koncentrací na elementech



Obrázek 23 - Program v průběhu vyhledávání

Po vyplnění všech nastavení stiskneme tlačítko Start. Program začne prohledávat soubory a postupně vypisovat hodnoty koncentrací s indexem souboru, ve kterém ji našel. V pravém dolním rohu nás „progress bar“ informuje o průběhu hledání. (Obrázek 23)

Po skončení vyhledávání program vytvoří soubor data.csv, do kterého uloží hodnoty koncentrací. Soubor můžeme otevřít v programu Microsoft Excel.

Část výkonného kódu:

```
String^ ulozeni;
File^ soubor;
if(soubor->Exists("data.csv")){
    soubor->Delete("data.csv");}
    //pokud je ve slozce soubor s daty, smazeme ho,aby jsme mohli
    vytvorit nový

int vyskyt;
int pocet;

vyskyt = int::Parse(textBox_vyskyt->Text);
    //kolikaty vyskyt chceme najít

for(int i=1; i<double::Parse(textBox_pocet->Text)+1; i++){
    //prohleda tolik souboru, kolik je uvedeno v proměné pocet

StreamReader^ cteni = gcnew StreamReader("mm"+i+"_t.pos");
    //vytvoření streamreadru pro čtení dat ze souboru

String^ radek = cteni->ReadToEnd();          //přečteme celý soubor
Regex^ reg = gcnew Regex("\r\n"+textBox_hledane->Text+" ",
RegexOptions::Multiline);
    //nastavení rekurzivního vyhledávání, hledáme naší hodnotu, před
    hodnotou je umístěn konec řádku a za hodnotou mezeru, aby nebyla
    hledaná hodnota uprostřed jiného čísla

Match^ shoda = reg->Match(radek);
    //vrátí shodu při nalezení naší hodnoty

pocet = 0;
while (pocet != vyskyt){
    //pokud nenajdeme hledany vyskyt tak prochazime dal soubor

    if(shoda->Success){
        if (backgroundWorker1->CancellationPending)
        {
            e->Cancel = true;
                //zastaví prohledávání při stisknutí tlačítka cancel

            return;
        }
        if((pocet+1) == vyskyt){
            //provede pokud jsme na námi zadané hodnotě
            proměné vyskyt
```

```

ulozeni = nullptr;
for(int j=0; j<9; j++){
    //z indexu shody zjistíme, kde se nachází
    hledaný výraz a vezmeme 10 znaku za nalezenou
    pozicí výrazu

    ulozeni = ulozeni + radek[shoda->Index+shoda->
    Length+j];
}
backgroundWorker1->
ReportProgress((double)i/(double)::Parse(textBox_pocet-
> Text)*100, (" "+i+" "+ ulozeni));
    //zde posíláme průběh prohledávání a předáváme
    text pro textbox

StreamWriter^ zapis = gcnew
StreamWriter("data.csv",true);
zapis->WriteLine(ulozeni);
zapis->Close();          //zápis hodnot do souboru

break;
}
pocet++;
shoda = shoda->NextMatch();
    //hledáme novou shodu, pokud jsme nedosáhli námi
    požadovaného výskytu
}
}
cteni->Close();
}

```

11.2.2 Zpracování sad koncentrací v programu Microsoft Excel

Koncentrace jsou uloženy v prvním sloupci listu. Ale nejsou seříděny podle velikosti (Obrázek 24). Sloupec tedy označíme a dáme seřadit pomocí standardního nástroje *Seřadit od nejmenšího k největšímu*. Po seřídění dat přiřadíme koncentracím hodnoty pravděpodobnosti od 0,005 po jednom procentu do 0,95 (Obrázek 25).

Ze seříděných a pravděpodobnostmi ohodnocených koncentrací můžeme vytvářet pravděpodobnostní grafy. Graf vytvoříme pomocí nástroje *Graf XY*, kde na osu X vynášíme hodnotu míry koncentrace a na osu Y pravděpodobnost.

	A	B
1	0.004915	
2		
3	0	
4		
5	0.000114	
6		
7	0	
8		
9	0	
10		
11	0.000001	
12		
13	0	
14		
15	0	
16		
17	0	
18		
19	0	
20		
21	0	
22		

Obrázek 24 - Koncentrace uložené programem

	A	B
66	0	0.655
67	0	0.665
68	0	0.675
69	0	0.685
70	0	0.695
71	0	0.705
72	0	0.715
73	0	0.725
74	0	0.735
75	0	0.745
76	0	0.755
77	0	0.765
78	0	0.775
79	0	0.785
80	0	0.795
81	0	0.805
82	0	0.815
83	0	0.825
84	0	0.835
85	0	0.845
86	0.000001	0.855
87	0.000114	0.865

Obrázek 25 - Koncentrace seřazené podle velikosti a s hodnotami pravděpodobnosti

11.3 Pravděpodobnostní grafy koncentrace radioaktivní látky

Z pravděpodobnostních grafů můžeme vyčíst, s jakou pravděpodobností se na zvoleném elementu neobjeví větší než námi zvolená míra koncentrace. Nás zajímá především s jakou pravděpodobností a v jaké míře látka pronikne na povrch. Jako element na povrchu melechovského masivu jsme zvolili element 17693, z důvodu očekávání vyšší hodnoty koncentrace na zvoleném elementu. Budeme sledovat také míru koncentrace na elementu v blízkém okolí úložiště a časovou dynamiku změn koncentrací, protože nám mohou napovědět, jak se bude látka šířit na povrch v pozdějších letech.

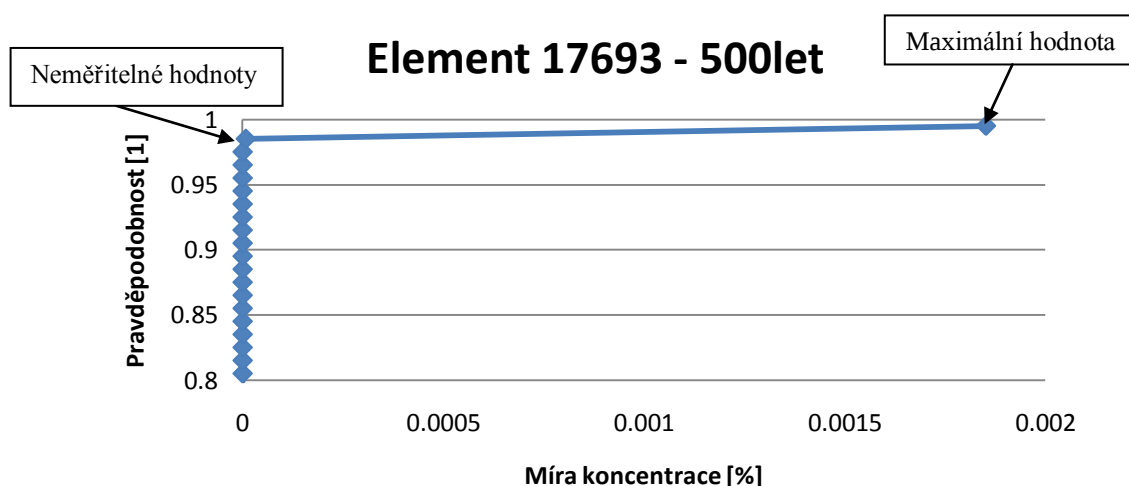
Protože pravděpodobnost průniku radioaktivní látky na element 17 693 byla velmi nízká, byl zvolen další element, který je blízký úložišti. Byl vybrán element 19657.

11.3.1 Povrchový element

Povrchový element 17693 je složen ze čtyř uzlů, které jsou na souřadnicích:

- 917 - 7023; 4111; 350 m.n.m.
- 2501 - 6855; 4380; 367 m.n.m.
- 5148 - 6998; 4305; 170 m.n.m.
- 239 - 6766; 4291; 362 m.n.m.

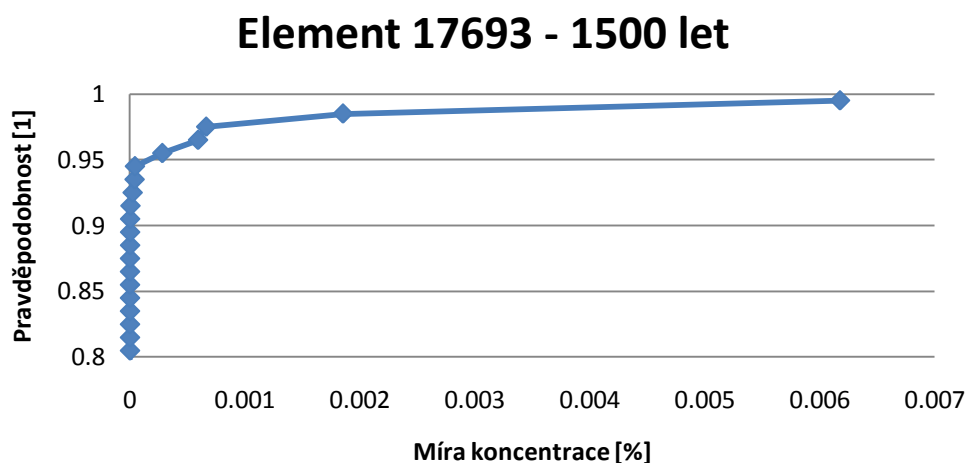
Z grafů příslušného elementu můžeme sledovat, jak se s postupujícím časem zvyšuje pravděpodobnost pronikající látky a její koncentrace. Z grafu 4 lze například zjistit, že po pětistí letech je pravděpodobnost 85%, že k průniku látky na povrch nedojde a s pravděpodobností 99% nestoupne koncentrace na povrchu přes hodnotu 0.015 % koncentrace zdrojového členu. Bližší vysvětlivky jsou uvedeny u každého vyobrazeného grafu, další výsledky jsou uvedeny v příloze 3.



Graf 1 - Pravděpodobnosti koncentrací na povrchovém elementu 17693 v čase 500let

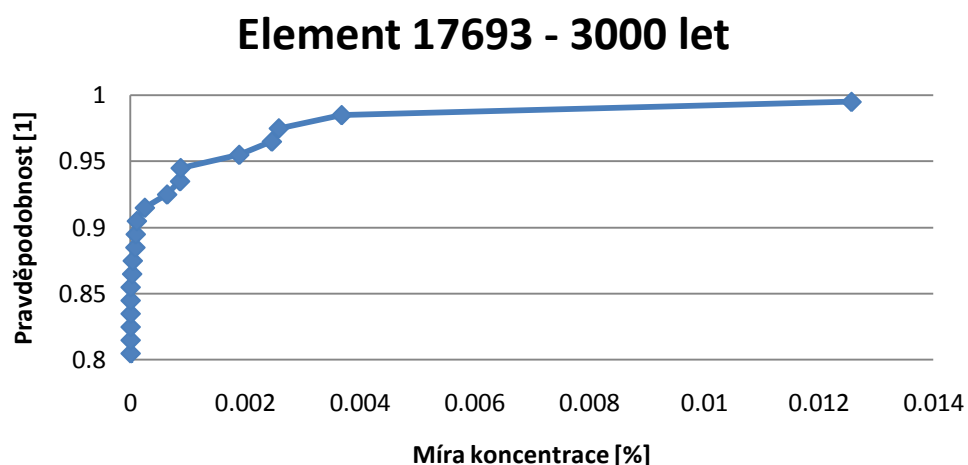
Z Graf 11 – koncentrace látky na elementu 17693 v čase 500let, lze vyvodit následující závěry. S pravděpodobností 99 % bude výsledná koncentrace na elementu neměřitelná (nulová). Maximální hodnota koncentrace, kterou jsme získali modelem při výpočtu z 100 realizací, je hodnota 0,002 % koncentrace zdrojového členu. V případě, že kritická hodnota koncentrace na povrchu je stanovena na 0,004 % (námi zvolená hodnota pro účely této práce), potom pravděpodobnost průniku je významně pod hranicí

jednoho procenta. Pro její přesnější stanovení je nutné buď zvýšit počet realizací, nebo použít sofistikovanější metody.



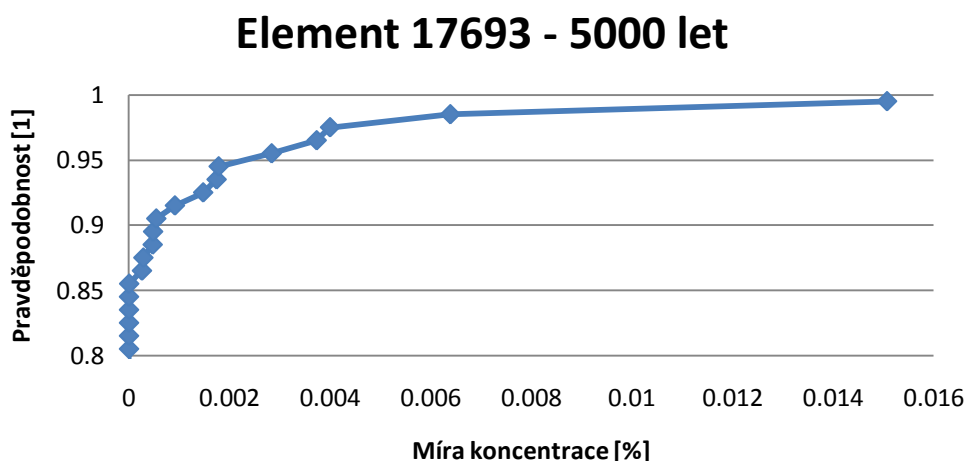
Graf 2 - Pravděpodobnosti koncentrací na povrchovém elementu 17693 v čase 1500let

Z Graf 2 - koncentrace látky na elementu 17693 v čase 1500let lze vyvodit následující závěry. S pravděpodobností 95 % bude výsledná koncentrace na elementu neměřitelná (nulová). Maximální hodnota koncentrace získaná z výpočtu je 0,0065 % koncentrace zdrojového členu. Námi stanovená kritická míra koncentrace 0.004 % bude na elementu 17693 po 1500 letech překročena s pravděpodobností asi 1 %.



Graf 3 - Pravděpodobnosti koncentrací na povrchovém elementu 17693 v čase 3000let

Z Graf 3 - koncentrace látky na elementu 17693 v čase 3000let lze vyvodit následující závěry. S pravděpodobností 90 % bude hodnota koncentrace na elementu neměřitelná (nulová). Maximální hodnota míry koncentrace, kterou byla zjištěna při výpočtu, je 0,013 % koncentrace zdrojového členu. Naše hypotetická kritická míra koncentrace 0,004 % bude překročena s pravděpodobností asi 2 %.



Graf 4 - Pravděpodobnosti koncentrací na povrchovém elementu 17693 v čase 5000let

Z Graf 4 - koncentrace látky na elementu 17693 v čase 5000 let, což je i čas na kterém končí naše simulace, lze vyvodit následující závěry. S pravděpodobností 85 % bude hodnota koncentrace na elementu neměřitelná (nulová). Maximální hodnota míry koncentrace z výpočtu je 0,015 % koncentrace zdrojového členu. Naše kritická míra koncentrace 0,004 % bude překročena s pravděpodobností asi 4 %.

Všechny grafy z povrchového elementu 17693 jsou uvedeny v příloze (kapitola 3).

Tabulka 2 zobrazuje konkrétní hodnoty koncentrací s příslušnými pravděpodobnostmi vykreslené v grafech 1 až 4. V tabulce vidíme s časem se zvyšující pravděpodobnost proniknutí látky na povrchový element 17693. Můžeme také vidět, že některé hodnoty, které se na grafu jeví jako nulové ve skutečnosti nulové nejsou, ale jedná se o hodnoty miliontin až statisícin procenta – což je zcela zanedbatelná hodnota.

Tabulka 2 - Pravděpodobnosti koncentrací ve všech letech uložení

P(X)	časy výskytu koncentrací									
	500let	1000let	1500let	2000let	2500let	3000let	3500let	4000let	4500let	5000let
0.845	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.855	0	0	0	0	0	0	0	0.000001	0.000001	0.000003
0.865	0	0	0	0.000001	0.000008	0.000026	0.000061	0.000114	0.000182	0.000258
0.875	0	0	0	0.000003	0.000013	0.000037	0.000081	0.000142	0.000212	0.000286
0.885	0	0	0.000001	0.000007	0.000031	0.000083	0.000165	0.000267	0.000376	0.000471
0.895	0	0	0.000001	0.000008	0.000034	0.000089	0.000173	0.000273	0.000376	0.000479
0.905	0	0	0.000001	0.000010	0.000043	0.000109	0.000207	0.000322	0.000438	0.000543
0.915	0	0	0.000004	0.000031	0.000110	0.000248	0.000425	0.000608	0.000774	0.000913
0.925	0	0.000001	0.000023	0.000127	0.000348	0.000636	0.000920	0.001156	0.001338	0.001475
0.935	0	0.000002	0.000040	0.000200	0.000503	0.000862	0.001186	0.001427	0.001605	0.001742
0.945	0	0.000002	0.000043	0.000212	0.000519	0.000873	0.001187	0.001443	0.001634	0.001783
0.955	0	0.000026	0.000281	0.000845	0.001445	0.001894	0.002195	0.002418	0.002620	0.002837
0.965	0	0.000078	0.000592	0.001393	0.002043	0.002463	0.002762	0.003042	0.003360	0.003732
0.975	0	0.000093	0.000663	0.001505	0.002162	0.002585	0.002901	0.003213	0.003574	0.003998
0.985	0.000008	0.000566	0.001853	0.002721	0.003222	0.003681	0.004243	0.004915	0.005649	0.006390
0.995	0.001853	0.004202	0.006177	0.008655	0.010861	0.012574	0.013759	0.014482	0.014876	0.015074

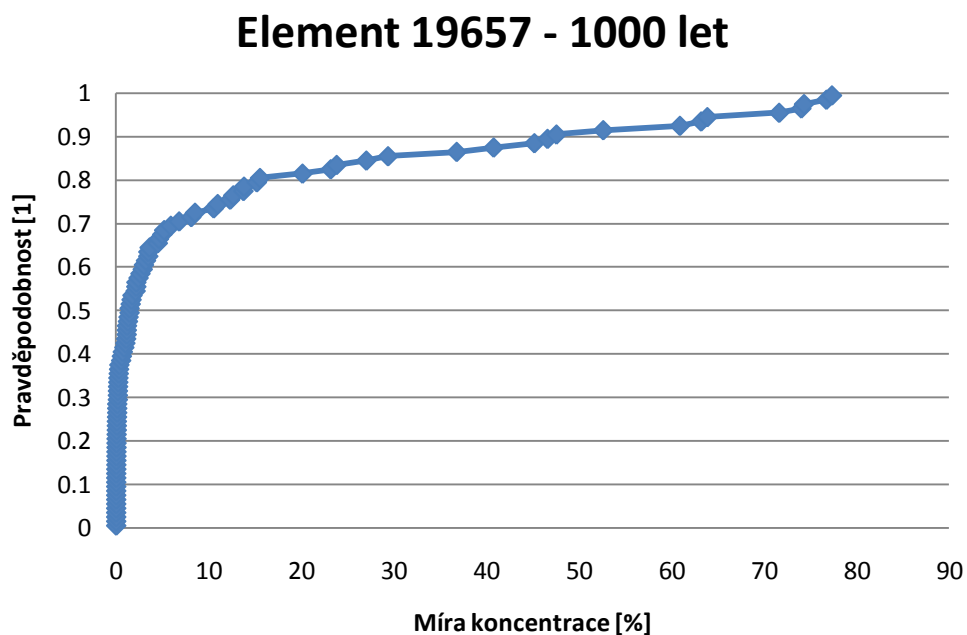
11.3.2 Element v blízkém okolí úložiště

Z důvodu výrazně nízkých hodnot koncentrací na povrchovém elementu jsme přistoupili k vytvoření grafů na obdobném elementu, který již není na povrchu oblasti. Daný element číslo 19 657 se vyskytuje v blízkosti úložiště, a tím pádem je zde vyšší pravděpodobnost průniku chemické látky.

Průběhy grafů koncentrací vyhotovené na elementu v blízkém okolí úložiště nám mohou napovědět, jakým způsobem bude látka pronikat i na povrchový element.

Jako element v blízkém okolí úložiště jsme zvolili element 19657. Je složen ze čtyř uzlů, které jsou na souřadnicích:

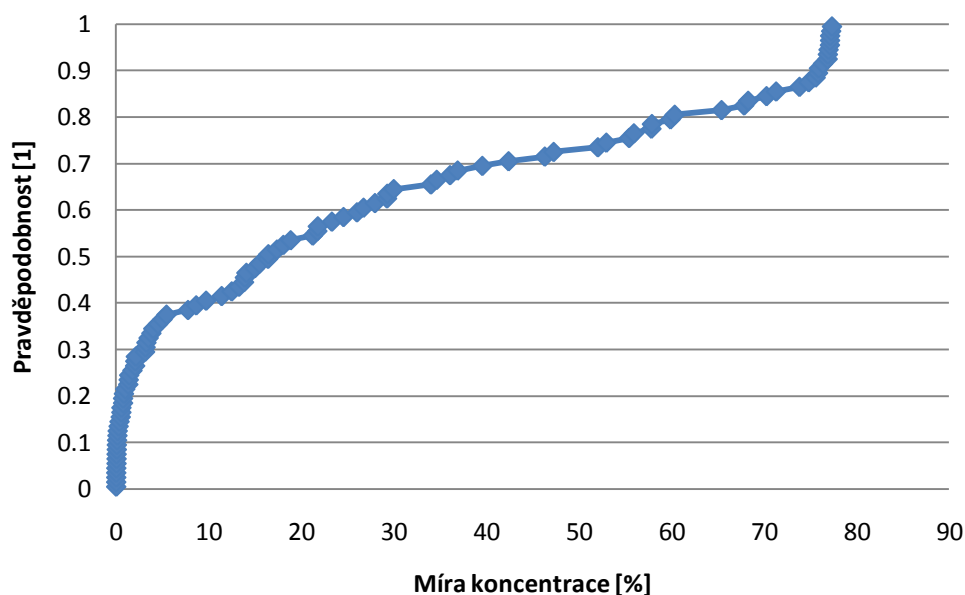
- 3380 - 5243; 5169; -267m.n.m.
- 3383 - 5180; 5257; 67m.n.m.
- 3384 - 5091; 5384; -292m.n.m.
- 5337 - 5327; 5503; -100m.n.m.



Graf 5 - Pravděpodobnosti koncentrací na elementu blízském úložišti 19657 v čase 1000let

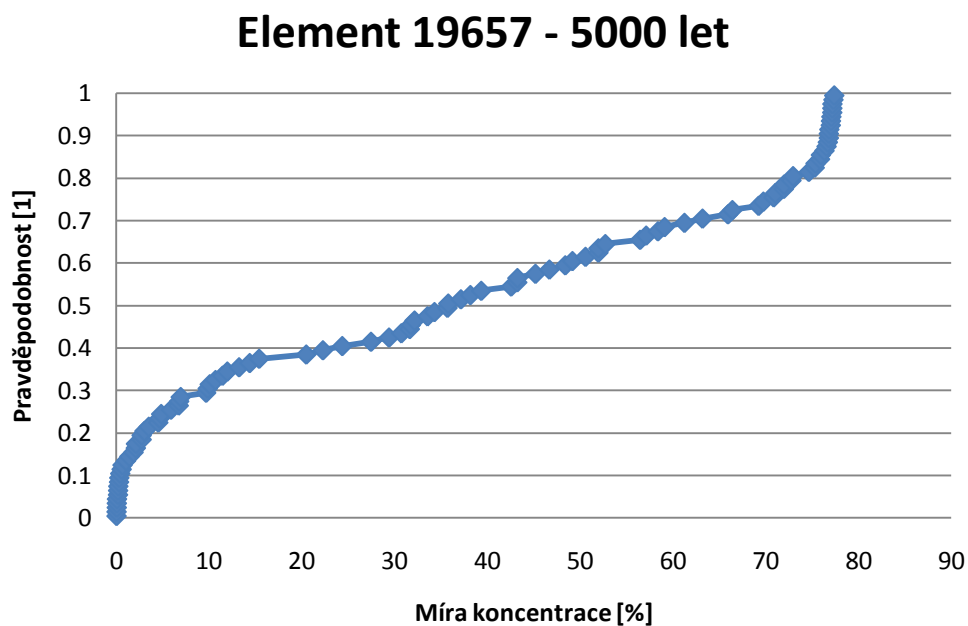
Z grafu 5 - koncentrace látky na elementu 19657 v čase 1000 let, lze vyvodit následující závěry. S pravděpodobností 40 % bude koncentrace na elementu nulová. S pravděpodobností 70 % bude koncentrace na elementu menší než 10 % koncentrace zdrojového členu. Poté možná míra koncentrace téměř lineárně vzrůstá až k hodnotě necelých 80 % koncentrace zdrojového členu, která bude překročena s pravděpodobností menší než 1 %.

Element 19657 - 3000 let



Graf 6 - Pravděpodobnosti koncentrací na elementu blízkém úložišti 19657 v čase 3000let

Z grafu 6 - koncentrace látky na elementu 19657 v čase 3000 let lze vyvodit následující závěry. S pravděpodobností 15 % bude hodnota koncentrace na elementu nulová. Do hodnoty asi 7 % koncentrace zdrojového členu, přes kterou koncentrace nepřekročí s pravděpodobností 40 %, vzrůstá možná míra koncentrace na elementu jen pomalu. Dále vzrůstá možná míra koncentrace až do hodnoty přibližně 75 % koncentrace zdrojového členu. Tato hodnota koncentrace nebude překročena s pravděpodobností 85 %. V poslední části grafu je vidět, že na elementu již dochází k saturaci koncentrace (maximální hodnota). Míra koncentrace vystoupá jen o několik jednotek procent na hodnotu necelých 80 % koncentrace zdrojového členu. Vzhledem k tomu, že došlo k saturaci koncentrace na elementu nebude tato hodnota s vysokou pravděpodobností překročena ani v následujících letech.



Graf 7 - Pravděpodobnosti koncentrací na elementu blízkém úložišti 19657 v čase 5000let

Z grafu 7 - koncentrace látky na elementu 19657 v čase 5000 let, lze vyvodit následující závěry. V posledním čase uložení, který máme k dispozici, je průběh podobný jako v čase 3000 let (viz. Graf 7 - Pravděpodobnosti koncentrací na elementu blízkém úložišti 19657 v čase 5000let). Z počátku koncentrace vzrůstá jen pomalu, s pravděpodobností 10 % bude nulová. Poté vidíme lineární část grafu až do hodnoty 75 % koncentrace zdrojového členu, která nebude překročena s pravděpodobností 80 %. V poslední části grafu vidíme, že opět dochází k saturaci na hodnotě necelých 80 % koncentrace zdrojového členu.

Všechny grafy z elementu 19657 naleznete v příloze 4.

Závěr

Cílem bakalářské práce bylo provést citlivostní analýzu vstupních geologických parametrů hydraulické vodivosti hlubinného úložiště radioaktivních odpadů pro oblast melechovského masivu. Z důvodů zajištění bezpečnosti úložiště bude provedena jedna z mnoha analýz rizik – v našem případě citlivostní analýza vstupních parametrů, které bude nutné provést. Vstupní parametry, pro které je analýza vyhotovena, jsou hydraulické vodivosti hornin a puklin nacházející se v oblasti masivu.

Popis oblasti melechovského masivu je vyhotoven v části Teorie – kapitola 1. Na základě informací získaných od geologů bylo zvoleno konkrétní místo uložení v melechovském masivu.

V rámci citlivostní analýzy jsme vytvořili 100 náhodných realizací - nových vstupních souborů s odlišnými hodnotami hydraulických vodivostí (kapitola 9). Nové hodnoty hydraulických vodivostí byly generovány z logaritmicko-normálního rozdělení, které je pro jejich popis nejvhodnější (kapitola 8.1). S novými vstupními soubory byly realizovány výpočty pomocí programu Flow123D (kapitola 10). Po provedení všech výpočtů bylo k dispozici 100 výstupních souborů. Výstupní soubory je možné zobrazit pomocí softwaru GMSH (kapitola 11.1). Toto zobrazení je však pro účely citlivostní analýzy nevyhovující. Abychom mohly vytvořit pravděpodobnostní grafy, bylo třeba z výstupních souborů vybrat příslušná data. Pro tento účel jsme vytvořily program, který ze všech výstupních souborů vybral hodnoty koncentrací na zvoleném elementu ve zvolený čas uložení (kapitola 11.2.1). Získané hodnoty poté software uložil do listu programu Microsoft Excel. V programu Microsoft Excel byla data dále zpracována a graficky zobrazena (viz 11.2.2).

Pravděpodobnostní grafy jsme vytvořili pro dva elementy. Jeden povrchový – element 17693 a jeden v blízkém okolí úložiště – element 19657. Z grafů povrchového elementu (Graf 1) jsme vyčetli, s jakou pravděpodobností a v jakém množství pronikne látka na povrch. Na zvoleném elementu v čase 5000 let nebude koncentrace na zvoleném povrchovém elementu s pravděpodobností 99 % vyšší než 0,015 % koncentrace zdrojového členu (viz Graf 4). V práci byla zvolena fiktivní kritická míra koncentrace - 0.004 % koncentrace zdrojového členu. Z grafů jsme poté určili, že tato hodnota bude po 500 letech překročena s pravděpodobností menší než 1 %, po 3000 letech bude

překročena s pravděpodobností asi 2 % a po 5000 letech bude překročena s pravděpodobností asi 4 %. Tato pravděpodobnost může představovat jeden ze základních vstupních údajů pro následnou analýzu rizik.

Pravděpodobností grafy vytvořené pro element blízký úložišti (Graf 5-7) nám napovídají, jakým způsobem by se látka mohla šířit směrem k povrchu v letech za hranicí našich simulací (5000 let). Z grafů vyplívá především to, že po určité době dochází k saturaci koncentrace na hodnotě, která již s velkou pravděpodobností nebude překročena. Na zvoleném elementu 19657 je maximální míra koncentrace přibližně 80 % koncentrace zdrojového členu (element je v bezprostřední blízkosti předpokládaného úložiště).

Určení citlivosti vstupních parametrů na průnik látky na povrch je důležitá část pro zajištění bezpečnosti úložiště. Jako navazující práce lze vytvořit mapy, které budou popisovat míru koncentrace na všech povrchových elementech a tím pádem budou vhodné pro stanovení pravděpodobnostní složky rizika na dané oblasti. Pomocí této práce bude možné stanovit možné rizika na okolí jako například lidské životy, obyvatelnost oblasti, vodní zdroje atd.

12 Citovaná literatura

- [1] *Správa úložišť radioaktivních odpadů*. [Online] Správa úložišť radioaktivních odpadů. [Citace: 24. duben 2010.] <http://www.surao.cz/>.
- [2] **Rukavičková L.** *Příprava vstupních geologických dat (v širším slova smyslu) pro matematické modelování transportu a geochemické interakce v horizontu stovek tisíců let (DZZ 4.2.). Dílčí závěrečná zpráva projektu „Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů“*. Praha : ČGS, 2008.
- [3] **Královcová J., Kopal J., Maryška J., Císařová K.** *Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů. Dílčí závěrečná zpráva. Výpočet scénářů vývoje migrace vybraných radionuklidů*. Liberec : Technická univerzita v Liberci, 2009.
- [4] **Rukavičková L.** *Hodnocení procesů na základě informací a dat získaných terénním výzkumem žulových těles v Podlesí, v melechovském masivu a v žulách VPB (vodovodní přivaděč Bedřichov). (DZZ +.2.). Dílčí závěrečná zpráva projektu „Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů“*. Praha : ČGS, 2008.
- [5] **Královcová J., Maryška J., Chudoba J.** *Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů. Dílčí závěrečná zpráva. Návrh činností zahrnujících aplikaci koncepčních modelů a přípravu nástrojů pro posuzování ekologických následků za předpokladu různých okrajových podmínek a s uvažováním možných geologických změn*. Liberec : Technická univerzita v Liberci, 2009.
- [6] **Severýn O., Hokr M., Královcová J., Březina J., Kopal J., Tauchman M.** *Flow123D numerical simulation software for flow and solute transport problems in combination of fracture network and continuum. Documentation of file formats and brief user manual*. Liberec : Technická univerzita v Liberci, 2008.

- [7] **Geuzaine C., Remacle J. F.** Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. [Online] 21. Zář 2009. [Citace: 15. břez 2010.] <http://geuz.org/gmsh/>.
- [8] **Briš R.** *Inovační metody pro ocenění spolehlivosti prvků a systémů*. místo neznámé : Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, 2007. ISBN 978-80-248-1596-1.
- [9] *The MathWorks. Accelerating the pace of engineering and science*. [Online] The MathWorks. [Citace: 18. leden 2010.] www.mathworks.com.

Přílohy

Příloha 1

Formát souboru „mm.mtr“ [6]:

```
$MaterialFormat  
1.0 file-type data-size  
$EndMaterialFormat
```

```
$Materials  
number-of-materials  
material-number material-type <material-type-speci_c-data> [text]  
...  
$EndMaterials
```

Kde:

number-of-materials – Počet druhů materiálů a puklin v oblasti s odlišnými vlastnostmi.

material-number – Index materiálu nebo pukliny.

material-type – Typ puklina nebo hornina. (21 – puklina, 31 - hornina)

material-type-speci_c-data – Hydraulická vodivost v metrech za rok (m/rok).

```
$Storativity  
material-number <storativity-coe_cient> [text]  
...  
$EndStorativity
```

```
$Geometry  
material-number geometry-type <geometry-type-speci_c-coe_cient> [text]  
...  
$EndGeometry
```

```
$Sorption  
material-number substance-id sorption-type <sorption-type-speci_c-data> [text]  
...  
$EndSorption
```

```
$SorptionFraction  
material-number <sorption-fraction-coe_cient> [text]  
...  
$EndSorptionFraction
```

```
$DualPorosity  
material-number <mobile-porosity-coe_cient> <immobile-porosity-coe_cient>  
<nonequilibrium-coe_cient-substance(0)> ...<nonequilibrium-coe_cient-substance(n-1)>  
[text]  
...  
$EndDualPorosity
```

Příloha 2

Formát souboru „mm_t.pos“ [6]:

- První část:
Obsahuje informace o formátování souboru, použitých datových typech a je ve tvaru:

```
$MeshFormat  
2.0 file-type data-size  
$EndMeshFormat
```

- Druhá část:
Obsahuje informace o počtu a souřadnicích uzlů v síti popisující oblast.

```
$Nodes  
number-of-nodes  
node-number x-coord y-coord z-coord  
...  
$EndNodes
```

kde:

- *number-of-nodes* – Počet uzlů v síti popisující oblast.
- *node-number* – Index aktuálního uzlu.
- *x-coord y-coord z-coord* – Souřadnice aktuálního uzlu.

- Třetí část:
Obsahuje informace o elementech v síti. O jejich počtu tvaru a z jakých uzlů jsou složeny.

```
$Elements  
number-of-elements  
elm-number elm-type number-of-tags <tags> node-number-list  
...  
$EndElements
```

kde:

- *number-of-elements* – Počet elementů v síti popisující oblast.
- *elm-number* – Index aktuálního elementu.
- *elm-type* – Definuje geometrický tvar aktuálního elementu.

- Čtvrtá část:
Ve čtvrté části jsou sady koncentrací na jednotlivých elementech a čas, ze kterého sada pochází.

\$ElementData

time

save-step-number

number-of-elements

elm-number concentration

...

\$EndElementData

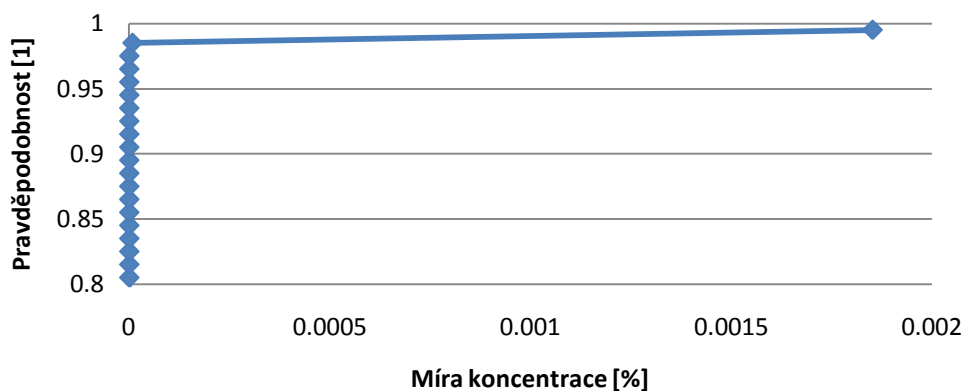
kde:

- *time* – Čas simulace (stovky let), ve kterém proběhlo uložení.
- *save-step-number* – Informace o kolikáté uložení se jedná. (počet uložení, viz 5.2)
- *nuber-of-elements* – Počet elementů v oblasti.
- *elm-number* – Index aktuálního elementu.
- *concentration* – Koncentrace na aktuálním elementu.

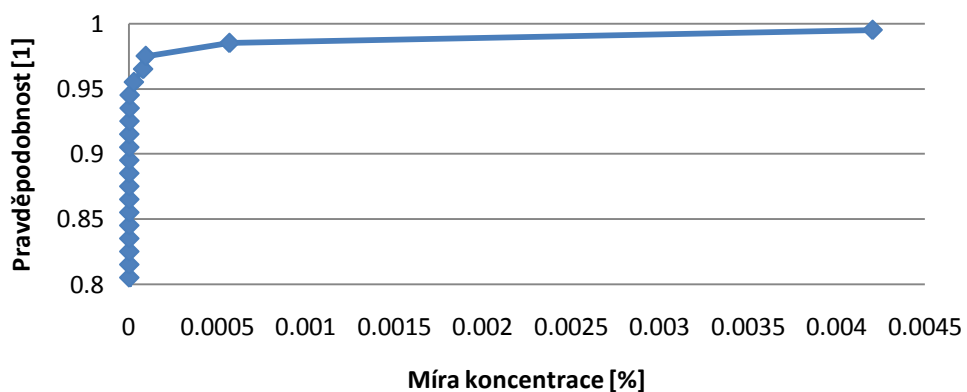
Příloha 3

Grafy koncentrací na povrchovém elementu 17693 v časech 500 až 5000 let.

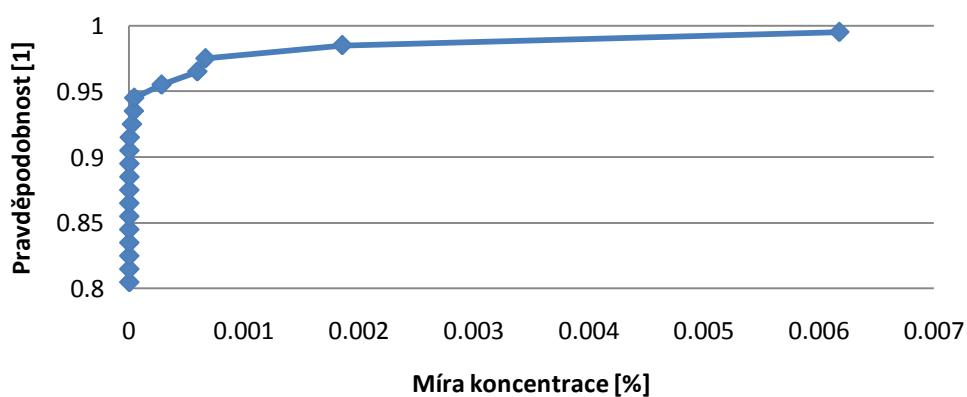
Element 17693 - 500let



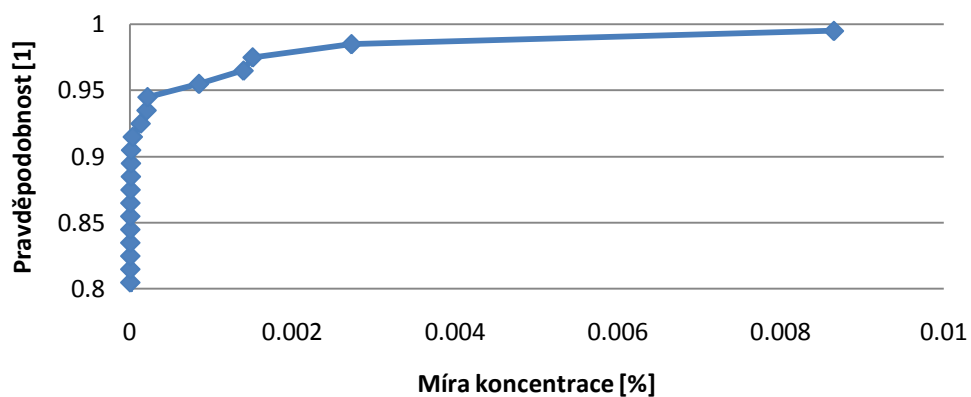
Element 17693 - 1000 let



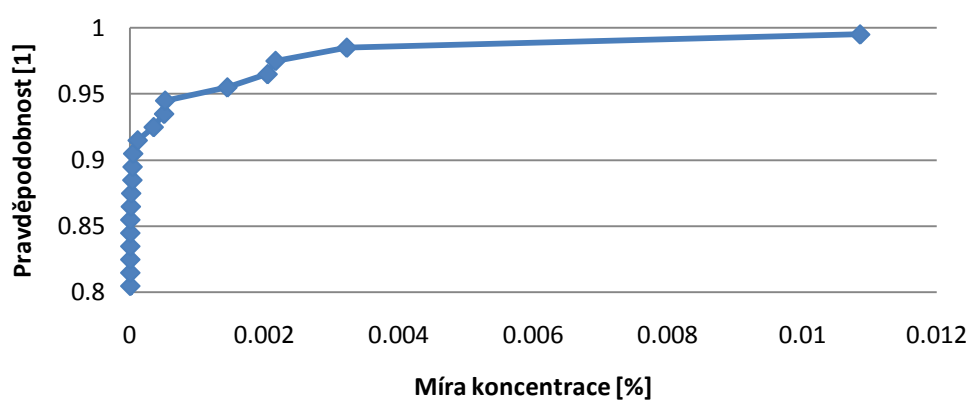
Element 17693 - 1500 let



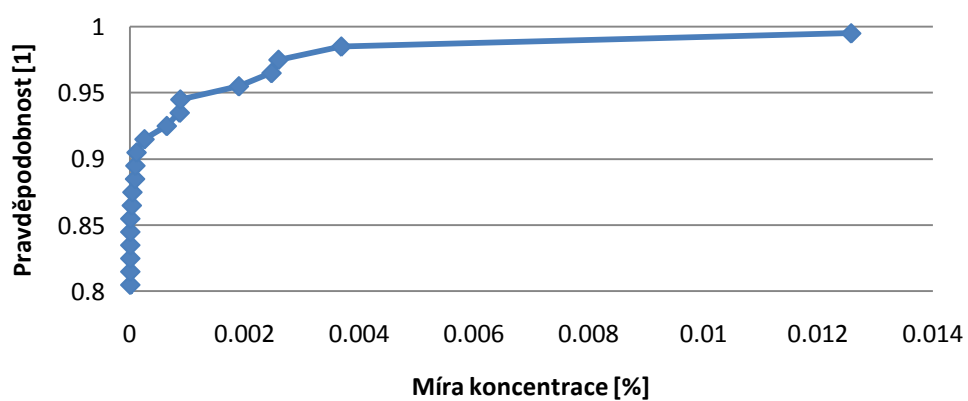
Element 17693 - 2000 let



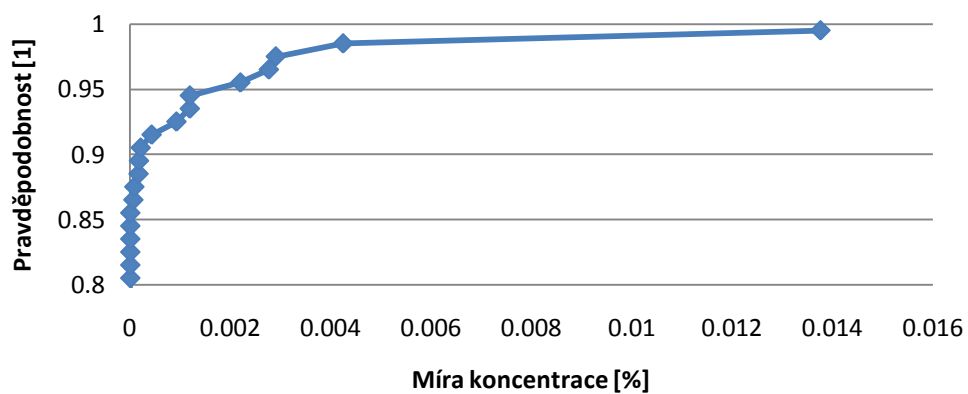
Element 17693 - 2500 let



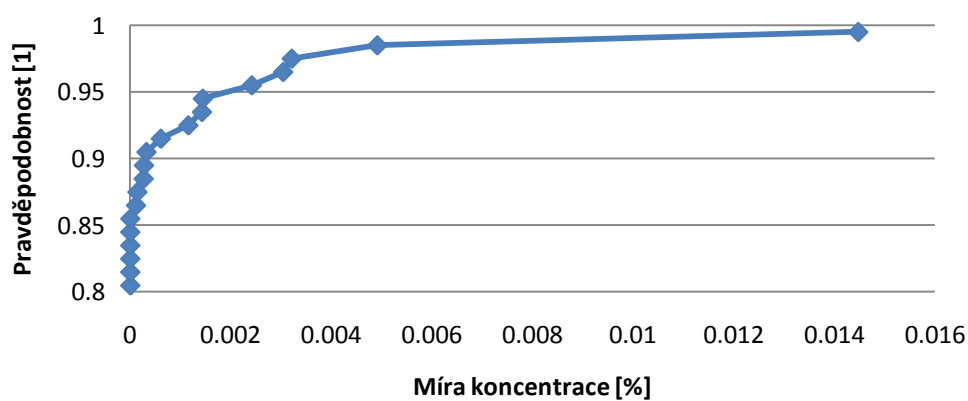
Element 17693 - 3000 let



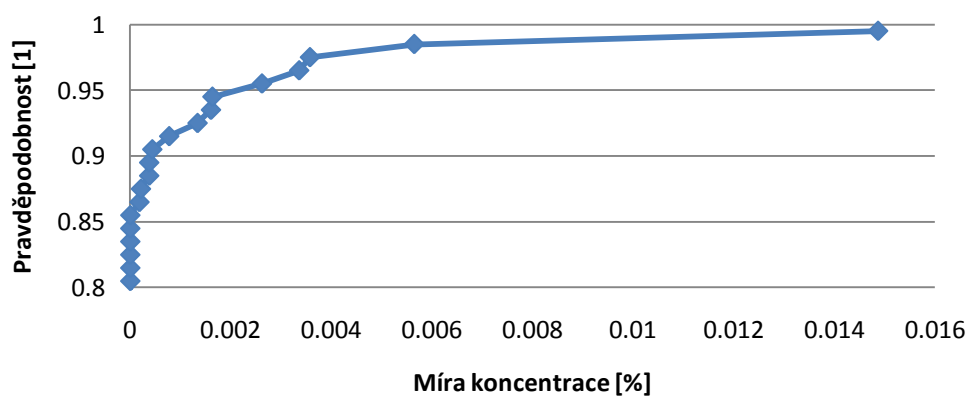
Element 17693 - 3500 let



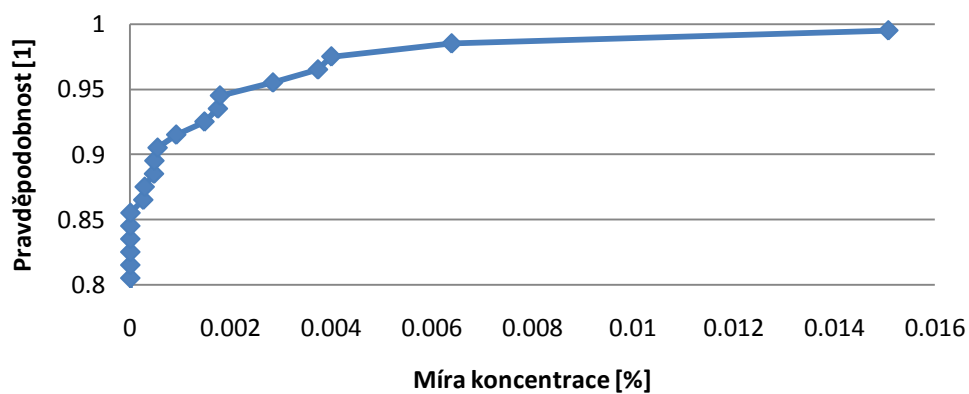
Element 17693 - 4000 let



Element 17693 - 4500 let



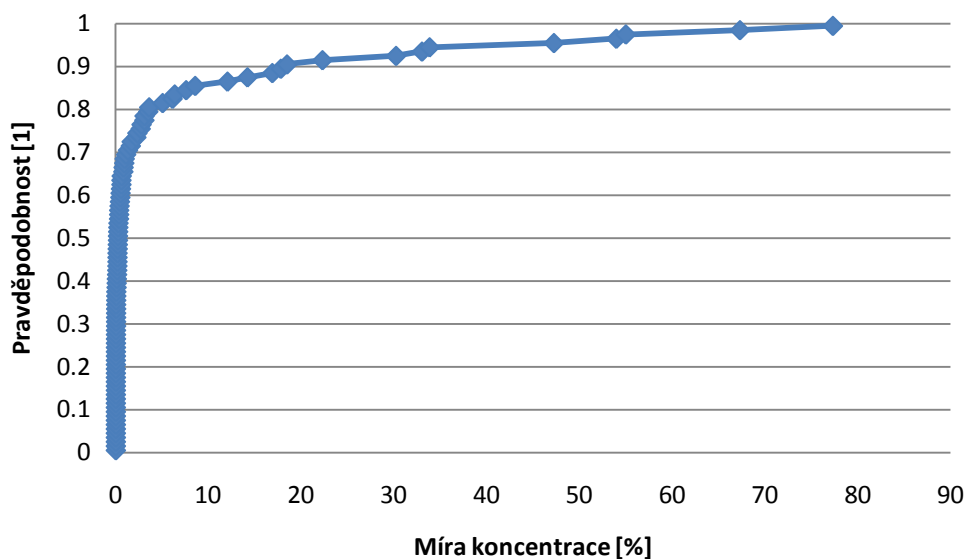
Element 17693 - 5000 let



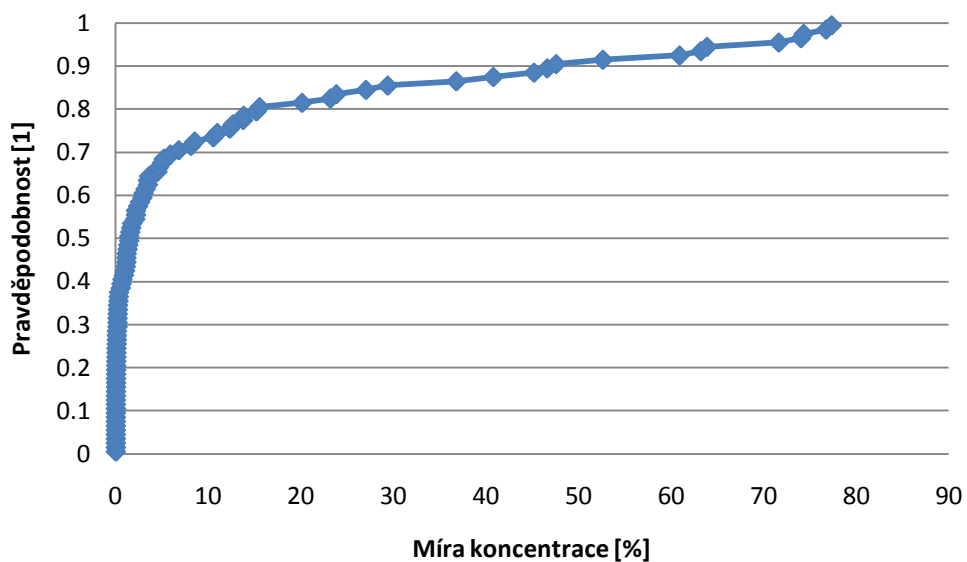
Příloha 4

Grafy koncentrací na elementu blízském číslo 19657 v časech 500 až 5000 let.

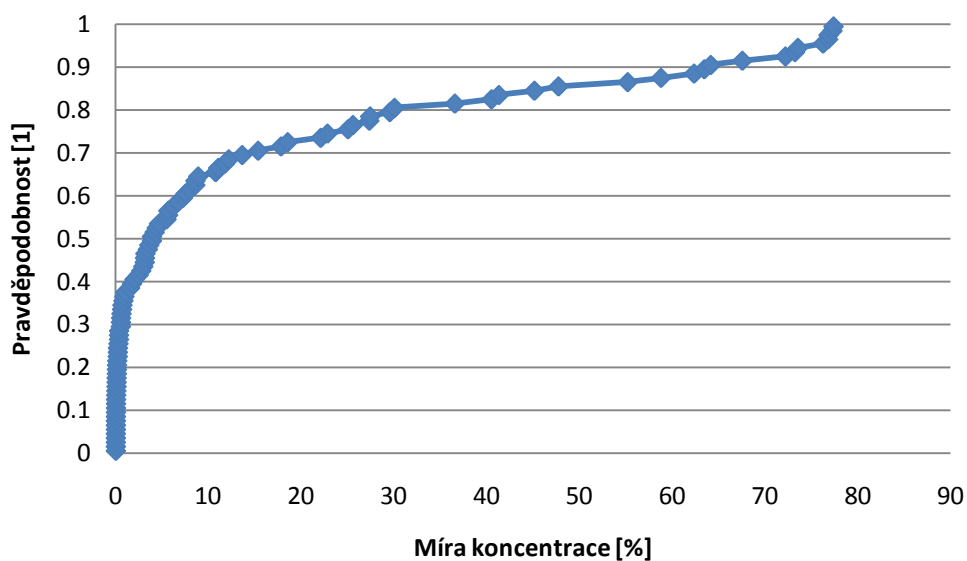
Element 19657 - 500 let



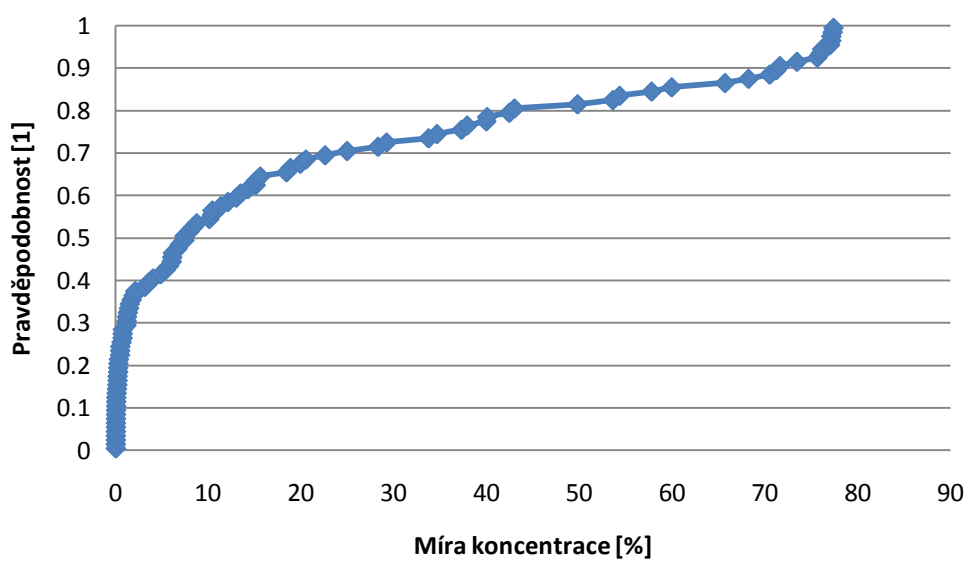
Element 19657 - 1000 let



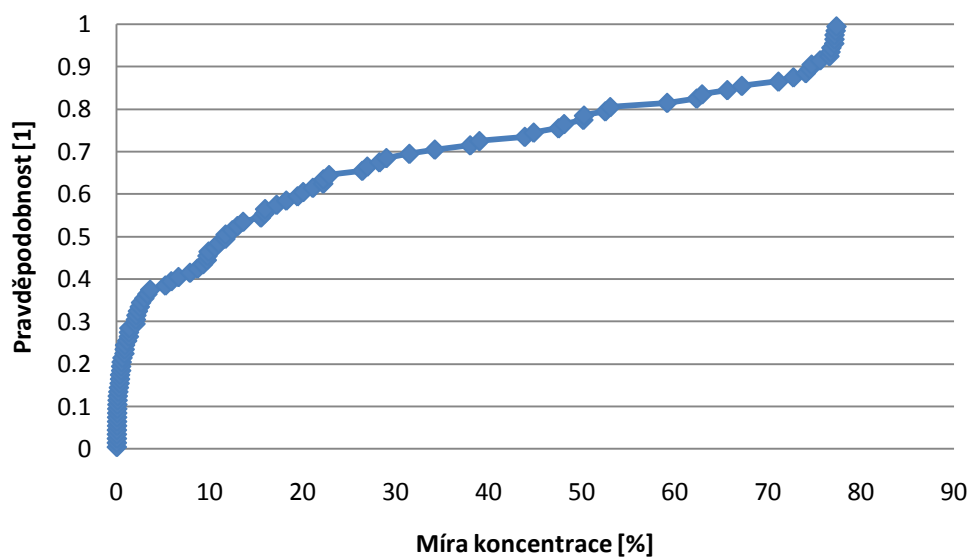
Element 19657 - 1500 let



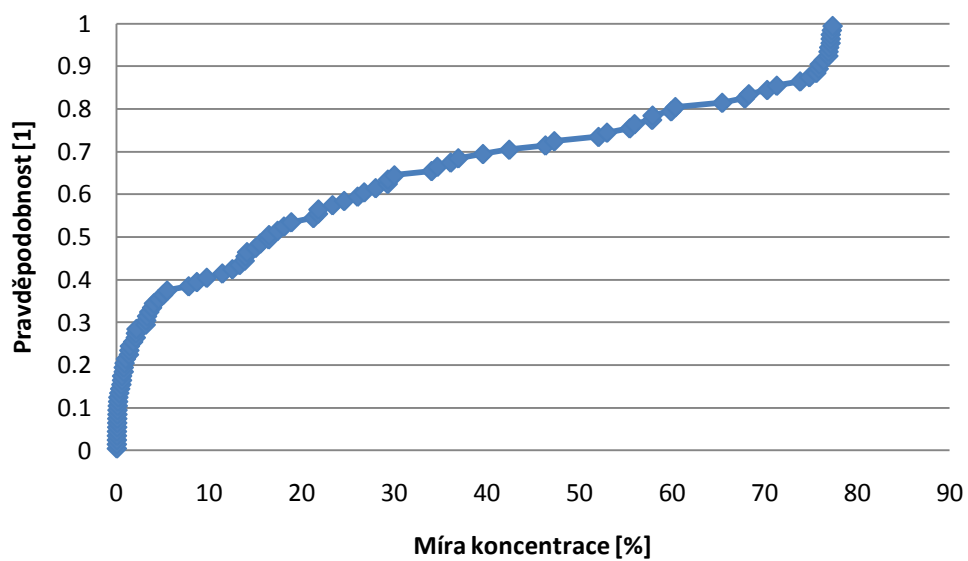
Element 19657 - 2000 let



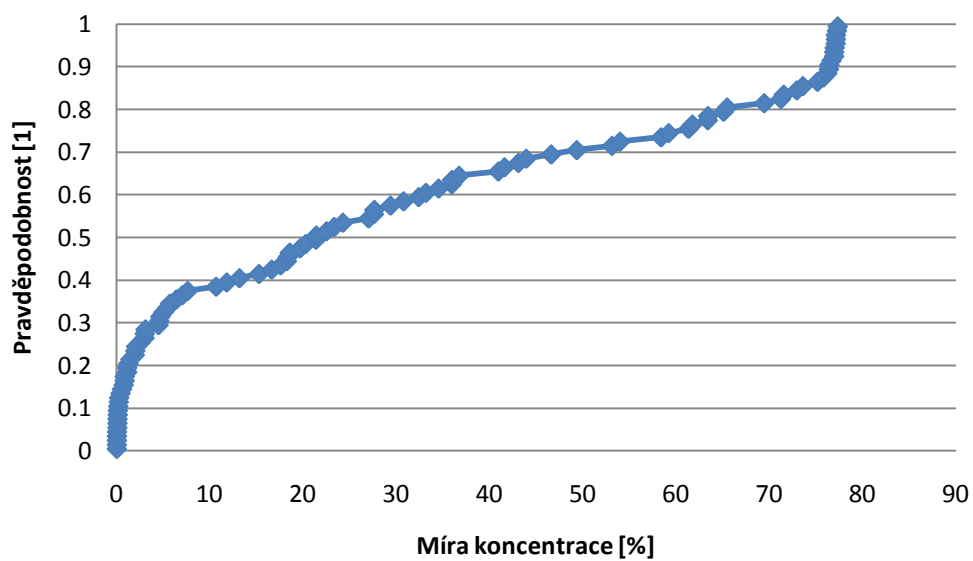
Element 19657 - 2500 let



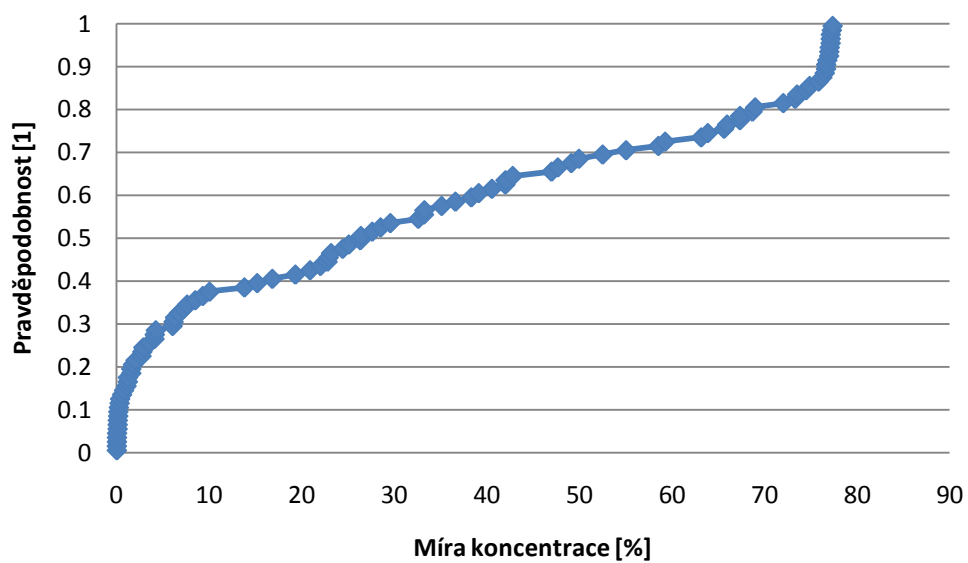
Element 19657 - 3000 let



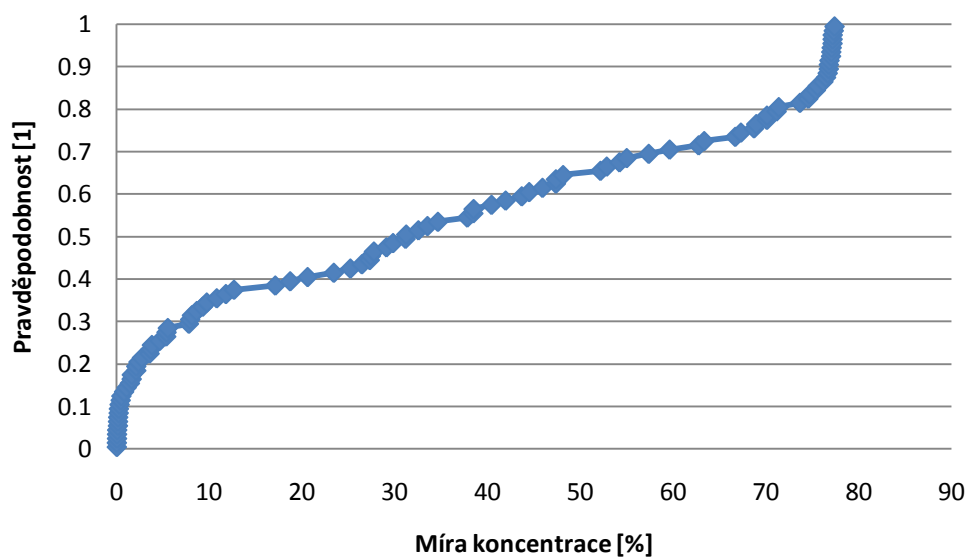
Element 19657 - 3500let



Element 19657 - 4000 let



Element 19657 - 4500 let



Element 19657 - 5000 let

