

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a
mezioborových inženýrských studií

DIPLOMOVÁ PRÁCE

2008

Jiří Kopal

Technická univerzita v Liberci

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Studijní program: N 2612 Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 3901T025 Přírodovědné inženýrství

Modelování transportu radionuklidů obsažených v granitové vodě v heterogenním horninovém prostředí

**The simulation of the transportation of the
radionuclides contained in the granite water in
the heterogenous rock medium**

Diplomová práce

Autor:

Bc. Jiří Kopal

Vedoucí práce:

prof. Dr. Ing. Jiří Maryška, CSc.

Konzultanti:

doc. Ing. Jiřina Královcová, Ph.D.

doc. Ing. Milan Hokr, Ph.D.

Ing. Otto Severýn, Ph.D.

V Liberci 16.5.2008

UNIVERZITNÍ KNIHOVNA
TECHNICKÉ UNIVERZITY V LIBERCI



3146089647

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Ústav nových technologií a aplikované informatiky

Akademický rok: 2007/2008

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

Jméno a příjmení: Bc. Jiří Kopal

studijní program: N 2612 – Elektrotechnika a informatika

obor: 3901T025 – Přírodovědné inženýrství

Vedoucí ústavu NTI Vám ve smyslu zákona o vysokých školách č.111/1998 Sb. určuje tuto diplomovou práci:

Název tématu: **Modelování transportu radionuklidů obsažených v granitové vodě v heterogenním horninovém prostředí.**

Zásady pro vypracování:

1. Seznamte se implementací modelů proudění granitové vody a transportu látek na kombinovaných sítích včetně řešení odvozených soustav lineárních rovnic.
2. Přípravte vstupní data pro výpočet transportu radionuklidů v heterogenním horninovém prostředí včetně vlivu dvojí porovitosti a zahrnutí vlivu sorpce.
3. Proved'te výpočty variantních scénářů transportu na kombinované síti s dynamickými změnami charakteristik. Výsledky modelů komentujte z hlediska dostupných měření VTZ v obdobných horninách i z hlediska předpokládaných rizik.

Prohlášení

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

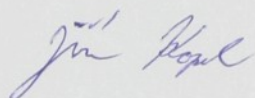
Beru na vědomí, že TUL má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé diplomové práce a prohlašuji, že s o u h l a s í m s případným užitím mé diplomové práce (prodej, zapůjčení apod.).

Jsem si vědom toho, že užít své diplomové práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou 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 konzultanty.

Datum: 16.5.2008

Podpis:



Poděkování

Rád bych poděkoval svému školiteli prof. Jiřímu Maryškovi za odborné vedení, podnětné připomínky a čas, který mi věnoval.

Dále bych rád poděkoval svým konzultantům doc. Jiřině Královcové, doc. Milanu Hokrovi a Ing. Otto Severýnovi za cenné rady a konzultace, které mě v mnohém obohatily.

V neposlední řadě bych rád poděkoval i své rodině za významnou pomoc a podporu během studia.

Jiří Kopal

Abstrakt

Práce pojednává o modelování transportu radionuklidů v granitovém prostředí a je motivována problematikou hlubinného úložiště radioaktivního odpadu. Cílem je porovnat významnost jednotlivých procesů, které retardaci radionuklidů v granitovém prostředí ovlivňují. První kapitoly jsou pojaty jako teoretický základ a uvádí šířku problematiky, které se práce věnuje. Stavba hydrogeologického modelu je ucelená - od popisu fyzikálních jevů přes tvorbu diskrétního matematického modelu až po jeho řešení. Práce zmiňuje i širší souvislosti, které jsou s hydrogeologickým modelováním spjaty s cílem uvést čtenáře co nejpodrobněji do komplexní problematiky. Nedílnou součástí práce je i numerická implementace, která navazuje na převzaté zdrojové kódy a rozšiřuje jejich funkčnost. Poslední kapitola práce se věnuje vyhodnocení výstupů simulací s teoreticky odvozenými poznatky a porovnává významnost jednotlivých procesů, které na transport v heterogenním granitovém prostředí působí.

Klíčová slova: matematické modelování, počítačová simulace, nelineární sorpce, migrace radionuklidů, rozklad operátoru

The abstract

This paper is dealing with the issue of simulation of the migration of the radionuclides in the granite media, it is motivated by the issue of the stowage space of the radionuclide waste. It proposes to compare the significance of the single processes, which influence the retardation of the radionuclides in the granite media. The first chapters are taken like the theoretical base and notice the issue width, which is the paper concerning to. The construction of the hydrogeological model is taken by the complex method - from the description of the physical effects through the creation of the discrete mathematical model to its solving. The paper mentions also the wider contexts, which are adherent with the hydrogeological simulation to with the aim of the introduction of the reader as deep as possible into the complex issue. The integral part of the paper is also the numerical implementation, which has been originating together with the paper, connects to the assumed spot heights and extends their functionality. The last chapter is turning to the evaluation of the outputs by the simulation with the theoretically derived findings and compares the significance of the single processes, which affect the transport in the heterogeneous granite media.

The key words: mathematical simulation, computer simulation, non-linear sorption, migration of the radionuclides, operator splitting

Obsah

Seznam obrázků	9
Seznam tabulek	10
Použité značení	11
1 Úvod	13
2 Fyzikální model	15
2.1 Základní charakteristika prostředí, procesů a veličin	15
2.2 Fyzikální popis úlohy ustáleného proudění	17
2.2.1 Okrajové podmínky úlohy proudění	18
2.3 Fyzikální model transportu	19
2.3.1 Výměna látky mezi mobilními a imobilními póry	19
2.3.2 Sorpce	19
2.3.3 Advekčně disperzní rovnice	22
2.3.4 Soustava transportních rovnic	24
2.3.5 Koeficient retardace	25
2.3.6 Okrajové a počáteční podmínky úlohy transportu	26
2.4 Studium na reálné hornině	27
2.4.1 Difuze v granitech	27
3 Matematický model	32
3.1 Matematická formulace úlohy ustáleného podzemního proudění .	32
3.1.1 Zavedení symboliky	32
3.1.2 Oblast řešení a její rozklad	33
3.1.3 Prostory integrovatelných funkcí	34
3.1.4 Slabé řešení úlohy podzemního proudění	35
3.1.5 Aproximační prostory funkcí	37
3.1.6 Generování báze funkcí z prostoru $\mathbf{RT}_{-1}^0(E_h)$	38
3.1.7 Diskretizace modelu	41
3.1.8 Multidimenzionální model	44
3.2 Matematická formulace úlohy transportu	48
3.2.1 Metoda rozkladu operátoru - OS	48

3.2.2	Definice OS pro ADXS problém	50
4	Numerické řešení	54
4.1	Řešení řídkých soustav rovnic	54
4.1.1	Předpodmínění	54
4.1.2	Iterační řešení symetrické indefinitní matice	55
4.2	Metoda konečných objemů	55
4.3	Řešení advekce	56
4.3.1	Stabilita upwind schématu	57
4.3.2	Numerická disperze	58
4.4	Řešení nerovnovážné výměny	58
4.5	Řešení rovnovážné sorpce	59
4.5.1	Lineární izoterma	60
4.5.2	Freundlichova izoterma	60
4.5.3	Langmuirova izoterma	61
4.6	Algoritmus	62
5	Testovací úlohy	63
5.1	Transport v homogenním prostředí	64
5.1.1	Transport bez interakcí s horninou	64
5.1.2	Transport se zahrnutím interakcí s horninou	65
5.2	Transport v heterogenním prostředí	72
5.2.1	Rovinná multidimenzionální úloha	72
5.2.2	Prostorová úloha	76
	Závěr	80
	Literatura	82

Seznam obrázků

2.1	Výměna mezi fázemi	17
2.2	Freundlichova izoterma	21
2.3	Langmuirova izoterma	21
2.4	Aniontové vyloučení	29
3.1	Sousednost puklinové sítě ve 3D	43
3.2	Napojení 3D a 2D prvků	45
3.3	Napojení 2D a 1D prvků	46
4.1	Schéma algoritmu	62
5.1	Homogenizovaný hranol horniny	64
5.2	Časový průběh koncentrace bez interakcí s horninou	64
5.3	Časový průběh koncentrace pro zadání 1a	66
5.4	Časový průběh koncentrace pro zadání 1b	66
5.5	Časový průběh koncentrace pro zadání 2a	68
5.6	Časový průběh koncentrace pro zadání 2b	68
5.7	Časový průběh koncentrace pro zadání 3a	70
5.8	Časový průběh koncentrace pro zadání 3b	70
5.9	Puklinová úloha	72
5.10	Průběh koncentrace pro lineární izotermu	74
5.11	Průběh koncentrace pro Freundlichovu izotermu	74
5.12	Postprocesing rovinné úlohy	75
5.13	Situační schéma prostorové úlohy	76
5.14	Časový vývoj vzdálenosti pole látek od místa kontaminace	78
5.15	Průběh střední rychlosti prostupu látek geologickou bariérou	78

Seznam tabulek

2.1	Hodnoty koeficientů interakce s okolím pro vody o vysoké síle iontů	30
2.2	Hodnoty koeficientů interakce s okolím pro vody o nízké síle iontů	31
5.1	Kombinace vstupních parametrů pro rovinnou úlohu	73

Použité značení

u	filtrační rychlost
v	skutečná rychlost
p	tlaková výška
p_T	vnější tlaková výška při zadání Newtonovy okrajové podmínky
p_D	tlaková výška podzemní vody při zadání Dirichletovy okrajové podmínky
π	dynamická složka tlaku
ρ	hustota vody
g	gravitační konstanta
$\mathbf{K}$	tenzor hydraulické propustnosti
q	hustota zdrojů v oblasti
n_i	imobilní porozita geologického prostředí
n_m	mobilní porozita geologického prostředí
n	celková porozita geologického prostředí
ψ	poměr plochy systému mobilních pórů k ploše systému všech pórů
$\mathbf{R}$	tenzor hydraulického odporu horninového prostředí
ϕ_c^{adv}	konvekční tok koncentrace látky
ϕ_c^{disp}	disperzní tok koncentrace látky
c_i	koncentrace v imobilní zóně
c_m	koncentrace v mobilní zóně
s_i	sorbované množství látky v imobilní zóně
s_m	sorbované množství látky v mobilní zóně
α	koeficient nerovnovážné výměny mezi póry
q_c^{exch}	výměna látky mezi systémy mobilních a imobilních pórů
q_s^{exch}	výměna látky mezi roztokem a sorbovanou fází
τ	tenzor tortuozity
$\mathbf{D}$	tenzor hydrodynamické disperze
$\mathbf{D}_m$	tenzor molekulární difuze
$\mathbf{D}_f$	tenzor mechanické disperze
K_D	distribuční koeficient lineární izotermy
K_F	koeficient Freundlichovy izotermy
α_F	2. koeficient Freundlichovy izotermy
K_L	koeficient Langmuirovy izotermy
s^{max}	2. koeficient Langmuirovy izotermy
F_f	formační faktor
ϱ_s	hustota pevné fáze geologického prostředí
n	porozita geologického prostředí
s	hmotnost sorbované látky na jednotkový objem pevné fáze

$\bar{s}$	hmotnost sorbované látky na jednotkovou hmotnost pevné fáze
Pe	Pécletovo číslo
R	koefficient retardace
Cr	Courantovo číslo
α_T	koefficient podélné disperzivity
α_L	koefficient příčné disperzivity
$\mathbf{n}$	jednotkový vektor vnější normály
D_a	zdánlivá difuzivita
D_p	difuzivita v pórech
D_e	efektivní difuzivita
D_w	difuzivita ve vodě
D_m	molekulární difuzivita
Ω	oblast řešení
E_h	rozklad oblasti Ω na systém podoblastí
Γ_h	množina stěn rozkladu oblasti Ω
σ	koefficient přestupu
λ	stopa tlakové výšky na mezelementových a okrajových stěnách
MH-FEM	smíšená hybridní metoda konečných prvků
H	vzdálenost pole látky od místa kontaminace
H_t	střední rychlost prostupu látky geologickou bariérou

Kapitola 1

Úvod

S rozvojem lidské civilizace neustále rostou i energetické nároky společnosti, tento nezadržitelný trend nás staví před otázku, jakým způsobem rostoucí poptávku po energii uspokojit. Spalování fosilních paliv nepatří k trvale udržitelným zdrojům a v současné době ani výroba energie z obnovitelných zdrojů nepatří k ekonomicky perspektivním zdrojům energie. Jaderná energie je v současné době nejperspektivnějším zdrojem pro získávání potřebného výkonu elektrické energie. Nevýhodou jaderné energie je vyhořelé palivo o vysoké radioaktivitě, které se postupně v meziskladech jaderného odpadu hromadí. Problematika migrace radionuklidů v granitovém prostředí je motivována studiem bezpečnosti plánovaného hlubinného úložiště vyhořelého radioaktivního paliva, které má být konečným řešením. Hlubinné úložiště musí být projektováno tak, aby se radioaktivní materiál po dobu své radioaktivity nedostal do biosféry, kde by hrozilo riziko kontaminace například i zdrojů pitné vody. Vzhledem k dlouhým poločasům rozpadu některých radionuklidů je matematicko-fyzikální modelování jediným vhodným prostředkem, kterým můžeme bezpečnost hlubinného úložiště hodnotit.

Tato práce se zabývá problematikou migrace radionuklidů v granitové vodě v horninovém prostředí, implementací numerických metod a rozšířením modulů simulačního softwaru Flow123d, který je na Ústavu nových technologií a aplikované informatiky Fakulty mechatroniky a mezioborových inženýrských studií Technické univerzity v Liberci vyvíjen. Tématika granitové vody není volena náhodně, neboť jedna z uvažovaných hostitelských hornin, ve které se uvažuje budovat hlubinné úložiště, je právě granit. Matematicko-fyzikální modelování procesů představuje velice významný nástroj, jehož pomocí můžeme predikovat vývoj migrace radionuklidů v blízké i ve vzdálené budoucnosti. Základem tvorby modelu je jeho matematicko-fyzikální popis a z něho vyplývající dokonalé pochopení vnitřních dějů, které se významným způsobem podílí na migraci. Verifikované a validované modely nám umožňují zhodnotit možnosti ovlivnění

daného procesu. Pro silně heterogenní a nelineární systémy je třeba vyvíjet speciální software, což je i tematikou této práce. Na migraci radionuklidů má vliv mnoho faktorů, cílem této práce je významnost jejich vlivu zhodnotit a zpracovat v grafické formě.

Oblast hydrogeologie je komplikovaná i z hlediska nedostatku vstupních dat, které jsou obvykle zadány jen v okolí vrtů a dále na základě expertních odhadů. Kalibrace modelů je prováděna porovnáním stavových veličin (například v kontrolních vrtech) s výstupy modelu. Problematika migrace radionuklidů je další etapou modelování, která následuje po výpočtu modelu proudění podzemní vody v granitech. Výstup úlohy proudění tvoří část ze souboru vstupních dat pro úlohu transportu. Je-li zadána úloha, jejíž výstupy mají tvořit podklady pro hodnocení rizika (v našem případě zasažení zdrojů pitné vody), je třeba vytvořit více variantních scénářů a řídit se těmi nejpesimističtějšími variantami. Variantní scénáře se tvoří na základě poznatků z podobných lokalit a z již zmíněných znaleckých posudků.

Práce je tematicky členěna do pěti základních celků, první kapitola je úvodem do problematiky a seznamuje s motivací práce. Druhá kapitola se věnuje charakteristice horninového prostředí a fyzikálnímu popisu uvažovaných procesů. V této kapitole je čtenář uveden i do celkové problematiky hydrogeologického modelování. Třetí kapitola je věnována matematickým metodám, které převádí původní spojitý problém do diskrétní formy. Klade se důraz na zachování charakteru horninového prostředí, a proto je popisována tvorba multidimenzionálního modelu. Tato metodika zahrnuje homogenizaci kompaktních bloků horniny a pukliny a vrty jsou modelovány pomocí prvků nižších dimenzí, které lépe vystihují jejich charakter. Čtvrtá kapitola je věnována numerickým metodám, které umožňují matematicky formulované problémy hydrogeologie efektivně řešit. V páté kapitole je řešena sada testovacích úloh, které porovnávají vlivy jednotlivých procesů na retardaci radionuklidů v horninovém prostředí. Na úlohách jsou ověřeny teoretické poznatky a demonstrovány úpravy provedené v softwaru Flow123d.

Teoretická část práce je pojata jako popis metodiky tvorby modelu a částečně jako popis metod implementovaných v softwaru Flow123d. U popisu implementace je dodržen jistý odstup od detailů, aby se čtenář dozvěděl jen věci skutečně důležité. Tento přístup čtenáři v případě zájmu usnadní i orientaci ve zdrojových kódech, které jsou součástí elektronické přílohy práce.

Kapitola 2

Fyzikální model

V této kapitole bude nastíněna charakteristika horninového prostředí, fyzikálních jevů a jejich mechanismů, které budeme v modelu uvažovat.

2.1 Základní charakteristika prostředí, procesů a veličin

Horninové útvary jsou narušovány erozním cyklem, tektonickou činností, prouděním vody a dalšími vlivy, které původně kompaktní masiv v různém makroskopickém měřítku narušují. Významnost jednotlivých procesů, které narušují horninu, je ovlivněna především hloubkou a polohou (blízkostí tektonického zlomu atp.). Hornina může být v relativně krátkém časovém intervalu významným způsobem porušena a do modelů je třeba tuto skutečnost zahrnout. Větší oblasti jsou charakteristické významnými heterogenitami (puklinovými systémy, geologickými zlomy...). V těchto útvarech se podzemní voda kvůli významně větší hydraulické propustnosti šíří mnohem větší rychlostí než v méně rozpukaném masivu. Zatím se budeme věnovat popisu šíření v kompaktních blocích masivu. Zde podzemní voda, kterou budeme v dalších kapitolách chápat jako nosné médium radionuklidů, může proudit pouze strukturou pórů. Geometrie struktury je dána charakterem horniny, její rozpukaností, narušením erozním cyklem atp. Porézní strukturu obecně chápeme jako materiál složený z vláken a zrn. V uvažovaném saturovaném prostředí jsou veškeré póry zaplněny vodou. Definujme reprezentativní elementární objem - REV, na který klademe požadavky, aby byl dostatečně malý vůči oblasti řešení a zároveň dostatečně velký oproti charakteristické velikosti struktury pórů. Zavedením REV přecházíme od veličin mikroskopických k veličinám makroskopickým. Přechod k makroskopickým veličinám nám každý REV jistým způsobem homogenizuje, využíváme dvou typů středních hodnot 2.1.1 a 2.1.2.

$$\hat{P}_\beta^{mac} = \frac{1}{V} \int_V P_\beta^{mic} dV \quad (2.1.1)$$

$$P_\alpha^{mac} = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta} P_\beta^{mic} dV \quad (2.1.2)$$

První přístup 2.1.1 průměruje mikroskopickou veličinu přes celý objem REV, zatímco druhý přístup 2.1.2 mikroskopickou veličinu průměruje pouze přes část objemu, kde se nachází fáze β . Přepočít mezi takto definovanými veličinami provádíme následně

$$\hat{P}_\beta^{mac} = \varepsilon_\alpha P_\beta^{mac}, \quad \text{kde} \quad \varepsilon_\beta = \frac{V_\beta}{V}. \quad (2.1.3)$$

Na takto zavedeném REV definuje bezrozměrné číslo porozity, značené n a definované jako

$$n = \frac{\text{objem pórů v REV}}{\text{objem REV}}. \quad (2.1.4)$$

Každý pór z REV se ale na proudění vody nepodílí, voda proudí pouze systémem pórů, který budeme dále nazývat jako mobilní. Takový systém pórů je obecně podmnožinou systému všech pórů. Póry, které se přímo podílejí na proudění, nazveme mobilními. Póry slepé, ve kterých voda neproudí, nazveme imobilními. Na základě této úvahy definujme porozitu mobilní - n_m a porozitu imobilní - n_i ,

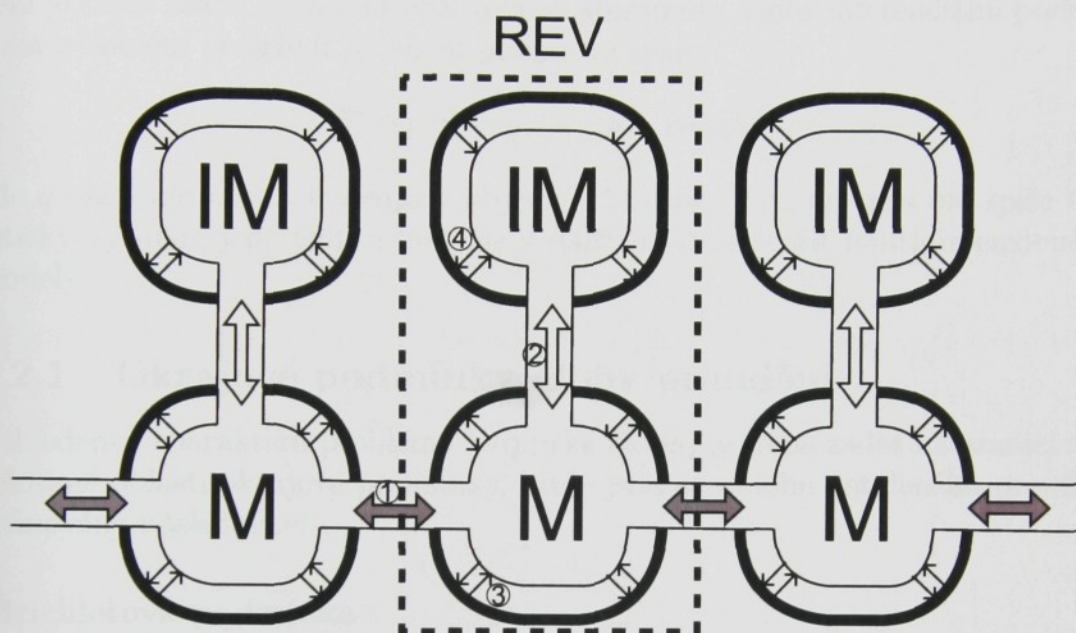
$$n_m = \frac{\text{objem mobilních pórů v REV}}{\text{objem REV}}, \quad (2.1.5)$$

$$n_i = \frac{\text{objem imobilních pórů v REV}}{\text{objem REV}}, \quad (2.1.6)$$

přičemž je zachována konzistence s původním zavedením porozity a platí $n_m + n_i = n$. Výměna látky mezi póry mobilními a imobilními probíhá na principu molekulární difuze. Oběma typům pórů přísluší jistý povrch materiálu pevné fáze, se kterým může transportovaná látka interagovat. Jako interakci v tomto smyslu budeme uvažovat adsorpci rozpuštěné látky na povrchu materiálu pevné fáze. Chemické reakce látky s horninou uvažovat v našem popisu nebudeme. Pro systém mobilních a imobilních pórů je třeba vymezit, s jak velkým povrchem horniny bude látka interagovat. Celý objem REV horniny parametricky rozdělíme na čtyři následující části

$$n_m + n_i + [\psi(1 - n_m - n_i)] + [(1 - \psi)(1 - n_m - n_i)] = 1, \quad (2.1.7)$$

kde parametr ψ udává poměr povrchu systému mobilních pórů horniny k celému povrchu horniny. Koeficienty takto rozdělených REV se dále projeví v rovnicích popisujících transport. Celkem budeme látku sledovat ve čtyřech fázích. Obrázek 2.1 znázorňuje situační schéma v REV, vyznačeny jsou i jednotlivé látkové výměny.



Obrázek 2.1: Výměna mezi fázemi

1. výměna látky advekcí - závislá na rychlosti proudění podzemí vody
2. výměna látky molekulární difuzí - závislá na geometrii pórů a difuzivitě ve vodě
3. výměna látky sorpcí v mobilním póru - závislá na sorpční izotermě a povrchu příslušného póru
4. výměna látky sorpcí v imobilním póru - závislá na sorpční izotermě a povrchu příslušného póru

2.2 Fyzikální popis úlohy ustáleného proudění

Fyzikální popis proudění podzemní vody vychází z Darcyho zákona, který v diferenciálním tvaru můžeme zapsat jako

$$\mathbf{u} = -\mathbf{K} \nabla(p + z), \quad p = \frac{\pi}{\rho \cdot g}$$

kde $\mathbf{u}$ označuje filtrační rychlost, p tlakovou výšku, z polohu ve zvoleném souřadném systému, π dynamickou složku tlaku, ρ hustotu vody a g gravitační konstantu. $\mathbf{K}$ je tenzorem hydraulické propustnosti, často budeme pracovat i s tenzorem hydraulického odporu, který budeme značit $\mathbf{R}$ ($\mathbf{R} = \mathbf{K}^{-1}$).

Dále budeme vycházet ze zákona zachování objemu. V problematice proudění je tento zákon reprezentován rovnicí kontinuity, jehož diferenciální podobu v saturovaném prostředí se zdroji píšeme ve tvaru

$$\nabla \cdot (\varrho \mathbf{u}) = q, \quad \varrho = \text{const.},$$

kde q označuje hustotu zdrojů v objemu. Zdrojový člen pro nás má spíše teoretický význam, jeho užitím budeme v další kapitole tvořit multidimenzionální modely.

2.2.1 Okrajové podmínky úlohy proudění

Vzhledem k charakteru problému (eliptická úloha) je třeba zadat na hranici modelované oblasti okrajové podmínky, které jsou pro úlohu ustáleného proudění definovány následovně:

Dirichletova podmínka

Na částech hranice Γ_D se známou tlakovou výškou podzemní vody (například hranice tvořená vodním tokem) předepisujeme Dirichletovy okrajové podmínky ve tvaru

$$p = p_D,$$

kde p_D je již zmiňovaná tlaková výška podzemní vody.

Neumannova podmínka

Na částech hranice Γ_N zadáváme normálový průtok jednotkovou plochou, který realizují Neumannovy okrajové podmínky ve tvaru

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_N,$$

kde $\mathbf{n}$ označuje jednotkový vektor vnější normály a skalární funkce u_N označuje tok vody hranicí. Obvyklým příkladem je Neumannova homogenní okrajová podmínka $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$, kterou zadáváme na vrstvách s vesměs velmi malou hydraulickou propustností.

Newtonova podmínka

Na zbývajících částech hranice Γ_T , kde je identifikace toků, případně tlakové výšky, obtížná, zadáváme Newtonovy okrajové podmínky vyjadřující vztah mezi tokem a spádem tlakové výšky. Tento vztah můžeme zapsat ve tvaru

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \sigma(p - p_T),$$

kde σ označuje koeficient přechodu a p_T je vnější tlaková výška. Identifikace těchto parametrů je obvykle předmětem kalibrace modelu.

2.3 Fyzikální model transportu

2.3.1 Výměna látky mezi mobilními a imobilními póry

Difuzní tok látky mezi mobilní a imobilní zónou (nerovnovážná výměna) popisujeme funkcí lineárně závislou na rozdílu koncentrací v mobilní a imobilní zóně dle vztahu 2.3.1.

$$q_p^{exh} = \alpha(c_i - c_m) \quad (2.3.1)$$

Symbolem q_p^{exh} označujeme výměnu koncentrace mezi mobilní a imobilní zónou, α je koeficient nerovnovážné výměny, který odvodíme dále a c_i , c_m koncentrace v imobilní a mobilní zóně. Výměna je závislá na molekulární difuzi, představa dvou objemů spojených válcovým tunelem délky l a průřezu S nám umožní vyjádřit koeficient výměny mezi póry pomocí molekulární difuze. Vycházejme ze vztahu $\phi_c^{dif} = D_m \nabla c$ pro jednorozměrný případ, q_p^{exh} pak můžeme vyjádřit relativní výměnu vztaženou k REV jako (2.3.2).

$$q_p^{exh} = \frac{S \phi_c^{dif}}{V_{REV}} = \frac{S D_m \frac{c_i - c_m}{l}}{Sl} = \alpha(c_i - c_m), \quad (2.3.2)$$

kde

$$\alpha \sim \frac{D_m}{l^2}. \quad (2.3.3)$$

Pro parametr α lze psát přibližný vztah (2.3.3), kde parametr l můžeme chápat jako charakteristickou délku.

2.3.2 Sorpce

Sorpce je složitý termodynamický proces s širokým rozmezím vazebné energie od van der Waalsových sil až po chemisorpci, představuje interakci mezi roztokem a horninou. Každá látka s horninou interaguje jiným způsobem a jsou látky, které

s ní neinteragují vůbec. Jedná se o zachytávání transportované látky na povrchu materiálu pevné fáze. Jev zachytávání na povrchu tělesa pevné fáze se nazývá adsorpce, naopak zpětné uvolňování z povrchu materiálu pevné fáze se nazývá desorpce. Podle rychlosti, jakou sorpce probíhá, rozlišujeme buď rovnovážnou nebo nerovnovážnou sorpci. Ve skutečnosti je každý sorpční děj nerovnovážný, kinetiku tohoto děje můžeme zanedbat v případě, kdy nedochází k rychlým změnám koncentrace, nebo v případě, kdy časové měřítko pozorování je mnohem větší než časová konstanta děje. Rovnovážný případ znamená, že mezi látkou na povrchu tělesa pevné fáze a látkou rozpuštěnou v roztoku dojde vždy k ustavení rovnováhy. Sorpci je v tomto případě možné vyjádřit pouze jako funkci koncentrace.

Nerovnovážná sorpce je dynamický děj (s pamětí), rovnováha mezi rozpuštěnou a sorbovanou látkou se zde ustavit vlivem rychlosti proudění nemusí. Sorbované množství látky v nerovnovážném případě nezávisí jen na okamžité hodnotě koncentrace rozpuštěné látky, ale i na čase. V takovém případě děj popisujeme jako velikost výměny látky mezi oběma fázemi, která je dána vzdáleností systému od rovnováhy. Výměna je funkce koncentrace v póru c a již sorbovaného množství látky na materiál pevné fáze, kterou budeme dále označovat jako s .

Sorbované množství můžeme vztáhnout k hmotnosti materiálu pevné fáze, jeho objemu, případně i objemu pórů. Symbolem s budeme značit hmotnost sorbované látky na jednotkový objem pevné fáze. V literatuře je běžnější vztahovat hmotnost sorbované látky na jednotkovou hmotnost porézního prostředí. Tuto veličinu označíme symbolem $\bar{s}$, přepočet mezi veličinami s a $\bar{s}$ realizuje vztah

$$\bar{s} = \frac{s}{\varrho_s}, \quad (2.3.4)$$

kde ϱ_s značí hustotu materiálu pevné fáze. Rovnovážný stav mezi sorbovanou koncentrací s a koncentrací v roztoku c popisují *sorpční izotermy*. Závislosti jsou obecně složité a velice silně závislé na teplotě, obvykle se pracuje s třemi následujícími aproximacemi:

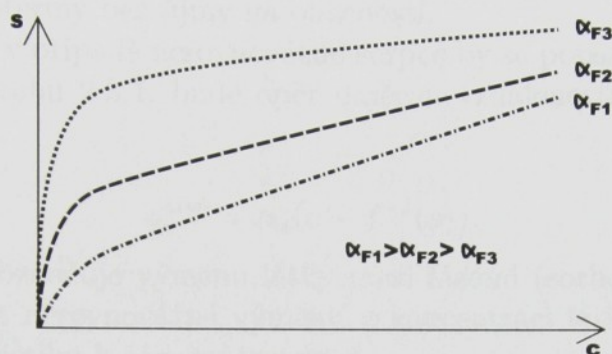
Lineární izoterma

$$s = k_D c, \quad k_D = \varrho_s K_D \quad (2.3.5)$$

Lineární izoterma je nejjednodušší sorpční izotermou, která je charakteristická tím, že nepopisuje saturovaný ani různě zaplněný stav povrchu materiálu pevné fáze.

Freundlichova izoterma

$$s = k_F c^{\alpha_F}, \quad k_F = \varrho_s K_F \quad (2.3.6)$$

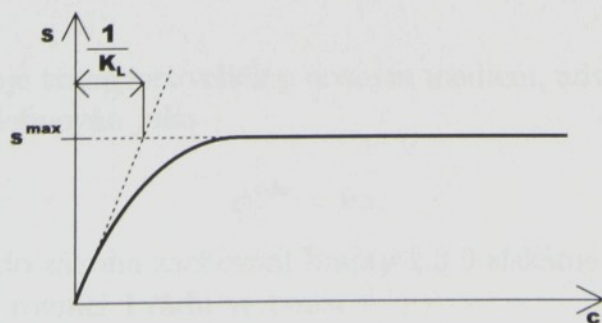


Graf 2.2: Freundlichova izoterma

Freundlichova izoterma je nelineární experimentální aproximací sorpční izotermy, která vychází z proložení dat v logaritmických souřadnicích. Koeficient α_F se reálně pohybuje v intervalu $\langle 0.1, 0.9 \rangle$. Izoterma je charakteristická absencí saturovaného stavu a nekonečnou směrnicí v počátku pro všechny reálné fyzikální koeficienty α_F .

Langmuirova izoterma

$$s = \frac{K_L s^{max} c}{1 + K_L c}, \quad s^{max} = \varrho_s \bar{s}^{max} \quad (2.3.7)$$



Graf 2.3: Langmuirova izoterma

Langmuirova izoterma je nelineární aproximací sorpčního děje, na rozdíl od dvou předchozích izoterm respektuje i hodnotu saturace materiálu pevné fáze.

Užití jednotlivých sorpčních izoterm je závislé na množství experimentálních dat a rozsahu možných koncentrací v roztoku. V mnoha případech proto můžeme využít lineární izoterm bez újmy na obecnosti.

Výměna látky v případě nerovnovážné sorpce by se popsala podobným způsobem jako ve vztahu 2.3.1, bude opět úměrná vzdálenosti obou systémů od rovnováhy, tedy

$$q_s^{exch} = \alpha_s (c - f^{-1}(s)), \quad (2.3.8)$$

kde symbol q_s^{exch} označuje výměnu látky mezi fázemi (sorbovanou a rozpuštěnou), α_s koeficient nerovnovážné výměny, c koncentraci látky v póru a $f^{-1}(s)$ inverzní charakteristiku k sorpční izotermě.

Existují i složitější sorpční modely než zde uváděná jednovrstvá sorpce. Příkladem je model vícevrstvé sorpce, kdy se adsorpcí na materiálu vytvářejí dipóly, které přitahují nabitě částice v roztoku. Modelování vícevrstvé sorpce je náročné a zabývat se jím nebudeme.

2.3.3 Advekčně disperzní rovnice

Transport látky unášené kapalným médiem popisuje advekčně-disperzní rovnice, která je formou zákona zachování hmoty. V obecném případě můžeme tuto rovnici psát ve tvaru

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \phi_c = r_c, \quad (2.3.9)$$

kde tok koncentrace ϕ_c se skládá ze dvou složek - advekční a disperzní.

Advekce

Advekce představuje transport veličiny nosným médiem, advekční tok ϕ_c^{adv} koncentrace látky je definován jako

$$\phi_c^{adv} = \mathbf{v}c. \quad (2.3.10)$$

Dosazením 2.3.10 do zákona zachování hmoty 2.3.9 získáme hyperbolickou partiální diferenciální rovnici 1.řádu ve tvaru

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \phi_c^{adv} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}c), \quad (2.3.11)$$

kde $\mathbf{v}$ značí rychlost pohybu média. Skutečná rychlost pohybu média není rovna filtrační rychlosti, je ovlivněna porozitou (v případě, že uvažujeme model dvojí porozity, tak její mobilní částí) a určuje se v našem případě dle vztahu

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{u}}{n_m}. \quad (2.3.12)$$

Hydrodynamická disperze

Molekulární difuze představuje transport látky proti směru gradientu hustoty veličiny (je ovlivněna mikroskopickou strukturou prostředí). Mechanická disperze je způsobena nehomogenitou rychlostí v pórech (v některých se šíří rychlostí nižší než průměrnou a v některých vyšší) a je důsledkem přechodu od popisu mikroskopického k popisu makroskopickému. Výsledný děj složený z molekulární difuze a mechanické disperze se nazývá hydrodynamická disperze. Rozdíl mezi molekulární difuzí a mechanickou disperzí je pouze v definici difuzního, resp. disperzního tenzoru. Disperzní tok ϕ_c^{disp} koncentrace látky je definován Fickovým zákonem jako

$$\phi_c^{disp} = -\mathbf{D}\nabla c. \quad (2.3.13)$$

Dosazením 2.3.13 do zákona zachování hmoty 2.3.9 získáme parabolickou partiální diferenciální rovnici 2.řádu ve tvaru

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \phi_c^{disp} = \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c), \quad (2.3.14)$$

kde $\mathbf{D}$ je tenzorem hydrodynamické disperze. Intenzita molekulární difuze nezávisí na rychlosti proudění, v izotropním prostředí je definována pouze skalárním koeficientem D_m . V porézním prostředí molekulární difuzi ovlivňuje geometrie pórů, která se vyjadřuje tenzorem tortuozity $\boldsymbol{\tau}$. Tortuozita je bezrozměrná veličina a vyjadřuje korekci na zakřivenost dráhy v pórech. V takovém prostředí již koeficient molekulární difuze není skalár, ale tenzor definovaný jako $\mathbf{D}_m = D_m \boldsymbol{\tau}$. Mechanická disperze se liší pouze vyjádřením tenzoru mechanické disperze $\mathbf{D}_f$, který je funkcí rychlosti proudění. Lze vyjádřit jako

$$[\mathbf{D}_f]_{ij} = \alpha_T |\mathbf{v}| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{|\mathbf{v}|}. \quad (2.3.15)$$

Koeficienty α_L , α_T vyjadřují podélnou a příčnou disperzivitou, disperze probíhá ve směru tečném na směr proudění s koeficientem $D_L = \alpha_L v$ a ve směru normálovém na směr proudění s koeficientem $D_T = \alpha_T v$. Tenzor hydrodynamické disperze $\mathbf{D}$ je definován jako součet tenzorů molekulární difuze a mechanické disperze.

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_m + \mathbf{D}_f \quad (2.3.16)$$

Pécletovo číslo

Poměr vlivů molekulární difuze a mechanické disperze na celkovou hydrodynamickou disperzi závisí na vlastnostech porézního média a měřítku pozorování. Charakter hydrodynamické disperze udává bezrozměrné Pécletovo číslo definované jako

$$Pe_1 = \frac{|\mathbf{v}|d}{D_m}, \quad (2.3.17)$$

kde d představuje střední velikost zrna. Malému Pe odpovídá převládající molekulární difuze, analogicky opačně. Pro $Pe > 20$ je běžné molekulární difuzi zcela zanedbat.

Z rovnic (2.3.11) a (2.3.14) dostáváme advekčně-disperzní rovnici:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot (\phi_c^{adv} + \phi_c^{disp}) = -\nabla \cdot (\mathbf{v}c) + \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c) \quad (2.3.18)$$

Rovnice je parabolického typu. V případě, že koeficient u disperzního členu je řádově menší než koeficient u členu advekčního, rovnice se blíží hyperbolickému typu, což má vliv při formulaci okrajových podmínek. Poměr advekce disperze dává do souvislosti bezrozměrné Pécletovo číslo, definované v této souvislosti jako

$$Pe_2 = \frac{|\mathbf{v}|L}{\|\mathbf{D}\|}, \quad (2.3.19)$$

kde L je charakteristický rozměr úlohy.

2.3.4 Soustava transportních rovnic

Zahrnutím vlivu sorpce a dvojí porozity v prostředí bez zdrojů (oblastí, kde látka vzniká) a nor (oblastí, kde je látka pohlcována) získáme rovnice ve tvaru

$$\begin{aligned} \frac{\partial(c_m + f_m(c_m))}{\partial t} + \nabla \cdot (c_m \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c_m) - \frac{\alpha}{n_m}(c_i - c_m) &= 0, \\ \frac{\partial(c_i + f_i(c_i))}{\partial t} + \frac{\alpha}{n_i}(c_i - c_m) &= 0. \end{aligned} \quad (2.3.20)$$

Většina veličin již byla popsána v předchozím textu. Funkce $f_m(c_m)$ a $f_i(c_i)$ jsou sorpční izotermy v mobilní a imobilní zóně závislé na příslušných koncentracích v pórech. Rozdílné indexy u izoterm poukazují na příslušnost k různě velkému povrchu materiálu pevné fáze v daných zónách. Pro modifikaci koeficientů použijeme vztah 2.1.7. Korekce na koeficientech, které je třeba u uvažovaných izoterm provést, se určují následujícím způsobem:

Lineární izoterma

$$k_{Dm} = K_D \varrho_s \frac{\psi(1 - n_m - n_i)}{n_m}$$

$$k_{Di} = K_D \varrho_s \frac{(1 - \psi)(1 - n_m - n_i)}{n_i}$$

Freundlichova izoterma

$$k_{Fm} = K_F \varrho_s \frac{\psi(1 - n_m - n_i)}{n_m}$$

$$k_{Fi} = K_F \varrho_s \frac{(1 - \psi)(1 - n_m - n_i)}{n_i}$$

Langmuirova izoterma

$$s_m^{max} = \bar{s}^{max} \varrho_s \frac{\psi(1 - n_m - n_i)}{n_m}$$

$$s_i^{max} = \bar{s}^{max} \varrho_s \frac{(1 - \psi)(1 - n_m - n_i)}{n_i}$$

Koeficient ψ je již zmiňovaný poměr mezi povrchem materiálu pevné fáze, který připadá mobilnímu póru, k celému povrchu materiálu pevné fáze. Určení tohoto parametru je problematické a je obvykle předmětem kalibrace modelu.

2.3.5 Koeficient retardace

Vyjdeme-li ze soustavy rovnic 2.3.20, můžeme za speciálních, dále specifikovaných podmínek odvodit maximální teoretický koeficient retardace, kterým se bude řídit transport látky v prostředí s dvojitou porozitou se zahrnutím vlivu

sorpce. Uvažujme lineární sorpční izotermu, vynásobením rovnic soustavy 2.3.20 příslušnými porozitami, získáme rovnice v následujícím tvaru

$$\begin{aligned} [n_m + \psi(1 - n)K_D \varrho_s] \quad & \frac{\partial c_m}{\partial t} + \nabla \cdot (c_m \mathbf{u}) - n_m \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_m) - \alpha(c_i - c_m) = 0, \\ [n_i + (1 - \psi)(1 - n)K_D \varrho_s] \quad & \frac{\partial c_i}{\partial t} + \alpha(c_i - c_m) = 0. \end{aligned} \quad (2.3.21)$$

Předpokládejme rovnovážnou výměnu mezi mobilními póry ($\alpha \rightarrow \infty$), koncentrace v pórech se v tomto případě vždy vyrovnají ($c_i = c_m$), za tohoto předpokladu můžeme rovnice soustavy 2.3.21 sečíst a vydělit mobilní porozitou. Získáme rovnici ve tvaru

$$R \frac{\partial c_m}{\partial t} + \nabla \cdot (c_m \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_m) = 0, \quad (2.3.22)$$

kde

$$R = 1 + \frac{n_i}{n_m} + \frac{(1 - n) K_D \varrho_s}{n_m}. \quad (2.3.23)$$

R je hledaným maximálním teoretickým koeficientem retardace, který udává, kolikrát bude migrace sledované látky zpomalena. Vliv koeficientu retardace bude na testovacích úlohách názorně ukázán.

2.3.6 Okrajové a počáteční podmínky úlohy transportu

Vzhledem k charakteru problému (evoluční úloha) je třeba zadat počáteční podmínku (rozložení koncentrací na oblasti řešení v čase $t = 0$). Dále musíme zadat i okrajové podmínky, které jsou pro úlohu transportu definovány následovně:

Dirichletova podmínka

Na části hranice Γ_D^t , kde dochází ke kontaktu s dobře míchaným roztokem o stálé koncentraci c_D , předepisujeme Dirichletovu okrajovou podmínku ve tvaru

$$c = c_D. \quad (2.3.24)$$

Neumannova podmínka

Neumannova podmínka předepisuje derivaci neznámé koncentrace na části hranice Γ_D^t , vzhledem k definici toku v úloze transportu ($\phi_c = -\mathbf{v}c + \mathbf{D} \nabla c$) se musíme omezit pouze na jeho disperzní část. Uvažujeme-li tuto podmínku na hranici Γ_N^t , předepisujeme ϕ_c^{disp} následovně

$$\phi_c^{disp} = (\mathbf{D}\nabla c) \cdot \mathbf{n}, \quad (2.3.25)$$

homogenní Neumannova podmínka se často předepisuje například na odtoku z oblasti.

Newtonova podmínka

Jde o obecně formulovanou podmínku předepsaného advekčně-disperzního toku koncentrace ϕ_c na uvažované hranici Γ_T^t , kterou předepisujeme ve tvaru

$$\phi_c = (-\mathbf{v}c + \mathbf{D}\nabla c) \cdot \mathbf{n}, \quad (2.3.26)$$

tuto podmínku užíváme v případě, kdy není možné použít Dirichletovu nebo Neumannovu okrajovou podmínku.

2.4 Studium na reálné hornině

V tomto oddílu si ukážeme jakým způsobem jsou fyzikální parametry hornin závislé na chemickém složení podzemních vod a popíšeme si procesy, které se zde uplatňují.

2.4.1 Difuze v granitech

Difuze je považována jako velmi významný mechanismus retardace nuklidů unikajících z hlubinného skalního úložiště jaderného odpadu. Již od roku 1970 bylo provedeno mnoho studií zabývajících se touto problematikou. Experimentální práce pokračují a metody popisu jsou stále zdokonalovány. Mnoho studií zahrnujících vliv porozity, sorpce a difuze pochází ze Švédska [5], [6], [7], [8]. Metody popisu v této části budou vycházet zejména z těchto prací. O jejich hodnotě vypovídá velice důkladný sběr dat z terénu. Pórovitost byla určována na vzorcích velikosti 1-2cm, pohybovala se mezi 0,1% až 1% a střední hodnota byla určena na 0,5%. Střední hodnota hustoty žuly byla stanovena na $\rho_s^{granite} = 2750 \text{ kg m}^{-3}$. Hodnota difuzního koeficientu se liší 10 – 100× dle studií i podle lokality.

Podzemní vody o vysoké síle iontů

Základním předpokladem pro následný popis je látka, která neinteraguje s horninou (například tritiová voda). Pro takovou látku můžeme psát vztah pro efektivní difuzivitu D_e ve tvaru součinu difuzivity dané látky ve vodě a parametru, který zahrnuje strukturní vlastnosti prostředí.

$$D_e = D_p n = D_w n \frac{\delta_D}{\tau} = D_w F_f, \quad (2.4.1)$$

kde D_w je difuzivita látky ve vodě, D_p difuzivita látky v pórech, δ_D je zúženost popisující brzdění molekulárního pohybu malou velikostí pórů, τ tortuozita a F_f formační faktor. Formační faktor může být měřen pomocí tritiové vody, rozpuštěného plynu nebo jiného elektricky neutrálního média srovnatelného s velikostí radionuklidů. Difuzivita tritiové vody ve vodě je $D_w = 2,4 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a formační faktor v granitech byl určen v rozmezí $F_f = 4 - 5 \cdot 10^{-5}$,

Studia difuze Sr^{2+} , Na^+ a Ca^{2+} jemně zrnitého granitu a užitím tritiové vody ukázala, že vztah mezi D_e kationtů a molekul HTO byl shodný jako v čisté vodě. To znamená, že negativně nabitě stěny póru ji významně neovlivňují. Při experimentu byla použita voda s vysokým obsahem solí o síle iontů 0,25. Na základě tohoto experimentu můžeme v těchto vodách určovat D_e i podle vztahu

$$D_e = D_{e,HTO} \frac{D_w}{D_{w,HTO}}. \quad (2.4.2)$$

Index HTO znamená, že koeficient je vztažen k nenabitě HTO molekule. Měřením difuze tritiové vody v reprezentativním vzorku granitu, kde podzemní voda obsahovala vysoký podíl silných iontů, byly získány reprezentativní difuzivity pro všechny látky vyskytující se v radioaktivním odpadu. Určení difuzivit je možné i pomocí elektrické vodivosti, ze které lze vypočítat F_f . Výše uvedený popis difuze látek neuvažoval interakci s horninou. Zahrnutím vlivu lineární sorpce získáme vztah pro zdánlivou difuzivitu (2.4.3).

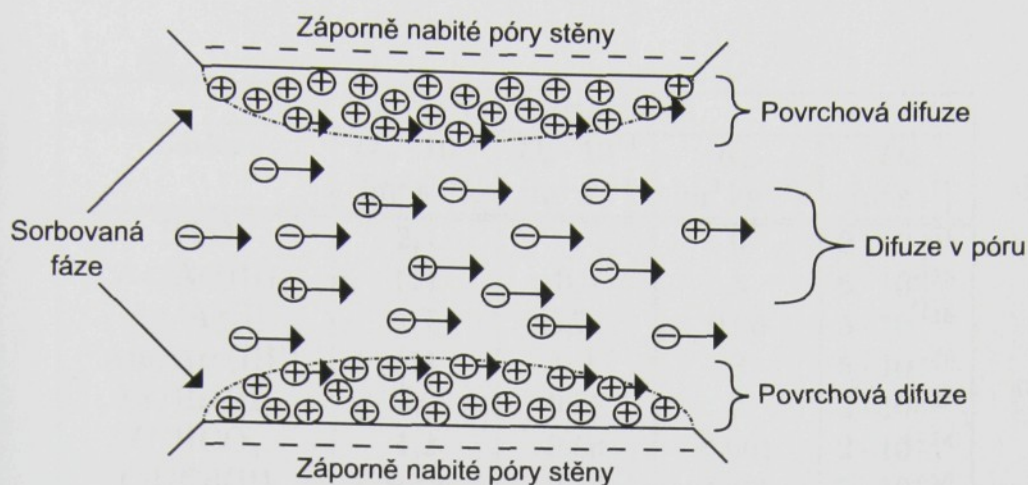
$$D_a = \frac{D_e}{n + \varrho_s K_D} \quad (2.4.3)$$

Podzemní vody o nízké síle iontů

V podzemních vodách o nízké síle iontů je D_e některých látek odlišná od očekávané. Pro anionty je D_e menší více jak $10\times$ a pro iontovou výměnu kationtů větší $10-100\times$. V případě aniontů to lze vysvětlit očekávaným elektrostatickým odpuzováním záporně nabitých aniontů a záporně nabitých stěn póru. Takové anionty nemají přístup do celého objemu póru viz. obrázek 2.4. Jev je známý jako aniontové vyloučení.

Pro iontovou výměnu kationtů jev způsobuje zvýšení efektivní difuze. Efektivní difuze je složena ze dvou jevů, a to difuze vody ve volných pórech a difuze sorbované fáze viz. obrázek 2.4. Protože vyšší koncentrace kationtů je v sorbované fázi než ve vodě v póru, přispívá tento efekt výrazně k difuzivitě.

Na základě zjištěných faktů je tak možné napsat vztah



Obrázek 2.4: Aniontové vyloučení

$$D_a = \frac{D_e}{n + \varrho_s K_D} = \frac{D_p n + D_s \varrho_s K_D}{n + \varrho_s K_D}, \quad (2.4.4)$$

kde D_s označuje povrchovou difuzivitu a $D_p n$ efektivní difuzi očekávanou ve volném póru.

Navržená efektivní difuzivita aniontů ve vodě o nízké síle iontů je $10\times$ menší než ve vodách silných iontů. Pro kationty, u kterých byla objevena migrace v sorbované fázi, byla navržena $10\times$ větší difuzivita než ve vodách silných iontů.

Shrnutí

U vody se silnými ionty je myšlena koncentrace solí 10000 mg l^{-1} a více, u vod se slabými ionty koncentrace 1000 mg l^{-1} a méně. Následující tabulky 2.1 a 2.2, převzaté z [6] obsahují jednotlivé parametry pro všechny prvky a látky, které se v radioaktivním odpadu vyskytují.

Vysvětlivky k tabulkám:

() Předpokládané hodnoty

[] Pravděpodobné očekávané hodnoty (nedostatek experimentálních dat)

Vody o vysoké síle iontů				
Látka	$D_w \cdot 10^{13}$ [m ² s ⁻¹]	$D_e \cdot 10^{13}$ [m ² s ⁻¹]	K_D [m ³ kg ⁻¹]	D_a [m ² s ⁻¹]
HTO	2,4	1	0	$2 \cdot 10^{-11}$
Ac/Ac(III)	(1)	0,4	3	$5 \cdot 10^{-18}$
Ag/Ag(I)	1,7	0,71	0,05	$5 \cdot 10^{-16}$
Am/Am(III)	(1)	0,4	3	$5 \cdot 10^{-18}$
Br/Br(III)	2,0	0,83	0	$2 \cdot 10^{-11}$
C/HCO ₃	1,2	0,50	0,001	$2 \cdot 10^{-14}$
Cd/Cd(II)	0,72	0,30	0,02	$5 \cdot 10^{-16}$
Cl/Cl ⁻	2,0	0,83	0	$2 \cdot 10^{-11}$
Cm/Cm(III)	(1)	0,4	3	$5 \cdot 10^{-18}$
Co/Co(II)	0,70	0,29	0,02	$5 \cdot 10^{-16}$
Cs/Cs(I)	2,1	0,88	0,05	$6 \cdot 10^{-16}$
Eu/Eu(III)	(1)	0,4	2	$7 \cdot 10^{-18}$
Ho/Ho(III)	(1)	0,4	2	$7 \cdot 10^{-18}$
I/I ⁻	2,0	0,83	0	$2 \cdot 10^{-11}$
Kr(inertní plyn)	(1)	0,4	0	$8 \cdot 10^{-12}$
Na/Na(I)	1,3	0,54	-	-
Nb/Nb(V)	(1)	0,4	1	$1 \cdot 10^{-17}$
Ni/Ni(II)	0,68	0,28	0,02	$5 \cdot 10^{-16}$
Np/Np(IV)	(1)	0,4	5	$3 \cdot 10^{-18}$
Pa/Pa(IV, V)	(1)	0,4	1	$1 \cdot 10^{-17}$
Pd/Pd(II)	(1)	0,4	0,01	$1 \cdot 10^{-15}$
Pu/Pu(III, IV)	(1)	0,4	5	$3 \cdot 10^{-18}$
Ra/Ra(II)	0,89	0,37	0,02	$7 \cdot 10^{-16}$
Se/Se(IV, VI)	(1)	0,4	0,001	$1 \cdot 10^{-14}$
Sm/Sm(III)	(1)	0,4	2	$7 \cdot 10^{-18}$
Sn/Sn(IV)	(1)	0,4	0,001	$1 \cdot 10^{-14}$
Sr/Sr(II)	0,79	0,33	0,0002	$6 \cdot 10^{-14}$
Tc/TcO ₄ ⁻	(1)	0,4	0	$8 \cdot 10^{-12}$
Tc/Tc(IV)	(1)	0,4	1	$1 \cdot 10^{-17}$
Th/Th(IV)	0,15	0,063	5	$5 \cdot 10^{-19}$
U/U(IV)	(1)	0,4	5	$3 \cdot 10^{-18}$
Zr/Zr(IV)	(1)	0,4	1	$1 \cdot 10^{-17}$

Tabulka 2.1: Hodnoty koeficientů interakce s okolím pro vody o vysoké síle iontů

Vody o nízké síle iontů				
Látka	f	$D_e \cdot 10^{13}$ [m ² s ⁻¹]	K_D [m ³ kg ⁻¹]	D_a [m ² s ⁻¹]
HTO	1	1,0	0	$2 \cdot 10^{-11}$
Ac/Ac(III)	1	0,4	3	$5 \cdot 10^{-18}$
Ag/Ag(I)	1	0,71	0,5	$5 \cdot 10^{-17}$
Am/Am(III)	1	0,4	3	$5 \cdot 10^{-18}$
Br/Br(III)	0,1	0,08	0	$2 \cdot 10^{-12}$
C/HCO ₃	0,1	0,05	0,001	$2 \cdot 10^{-15}$
Cd/Cd(II)	1	0,30	0,1	$1 \cdot 10^{-16}$
Cl/Cl ⁻	0,1	0,08	0	$2 \cdot 10^{-12}$
Cm/Cm(III)	1	0,4	3	$5 \cdot 10^{-18}$
Co/Co(II)	1	0,29	0,1	$1 \cdot 10^{-16}$
Cs/Cs(I)	10	9	0,5	$6 \cdot 10^{-16}$
Eu/Eu(III)	1	0,4	2	$7 \cdot 10^{-18}$
Ho/Ho(III)	1	0,4	2	$7 \cdot 10^{-18}$
I/I ⁻	0, 1	0,08	0	$2 \cdot 10^{-12}$
Kr(inertní plyn)	1	0,4	0	$8 \cdot 10^{-12}$
Na/Na(I)	10	5	-	-
Nb/Nb(V)	1	0,4	1	$1 \cdot 10^{-17}$
Ni/Ni(II)	1	0,28	0,1	$1 \cdot 10^{-16}$
Np/Np(IV)	1	0,4	5	$3 \cdot 10^{-18}$
Pa/Pa(IV, V)	1 [10]	0,4	1	$1 \cdot 10^{-17}$
Pd/Pd(II)	1	0,4	0,1	$1 \cdot 10^{-16}$
Pu/Pu(III, IV)	1	0,4	5	$3 \cdot 10^{-18}$
Ra/Ra(II)	1 [10]	0,37	0,1	$1 \cdot 10^{-16}$
Se/Se(IV, VI)	(1)	0,4	0,001	$1 \cdot 10^{-14}$
Sm/Sm(III)	1	0,4	2	$7 \cdot 10^{-18}$
Sn/Sn(IV)	1	0,4	0,001	$1 \cdot 10^{-14}$
Sr/Sr(II)	10	3	0,01	$1 \cdot 10^{-14}$
Tc/TcO ₄ ⁻	0,1	0,04	0	$8 \cdot 10^{-13}$
Tc/Tc(IV)	1	0,4	1	$1 \cdot 10^{-17}$
Th/Th(IV)	1	0,063	5	$5 \cdot 10^{-19}$
U/U(IV)	1	0,4	5	$3 \cdot 10^{-18}$
Zr/Zr(IV)	1	0,4	1	$1 \cdot 10^{-17}$

Tabulka 2.2: Hodnoty koeficientů interakce s okolím pro vody o nízké síle iontů

Kapitola 3

Matematický model

V této kapitole si popíšeme použité matematické metody a na jejich základě budeme definovat aproximaci řešení úlohy proudění a transportu.

3.1 Matematická formulace úlohy ustáleného podzemního proudění

V této části se postupně od matematického popisu proudění v kompaktních blocích horniny dostaneme až ke tvorbě multidimenzionálních modelů. Cílem bude vystihnout charakter horninového prostředí včetně puklinových sítí, průsečnic puklin a vrtů.

3.1.1 Zavedení symboliky

Závorková notace

Pro přehlednost zápisu použijeme v určitých místech odvození zápis integrálů pomocí závorkové notace. Skalární součin a hraniční formu v prostoru $\mathbf{L}^2(\Omega)$ resp. $\mathbf{L}^2(\Gamma)$ označíme:

$$\int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{g}(\mathbf{x}) d\Omega = (\mathbf{f}, \mathbf{g})_{\Omega},$$
$$\int_{\Gamma} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{g}(\mathbf{x}) d\Gamma = \langle \mathbf{f}, \mathbf{g} \rangle_{\Gamma},$$

kde Ω je integrační oblast a $\Gamma = \partial\Omega$ hranice oblasti Ω .

Restrikce funkcí

Dále v textu budeme často používat horní indexy u funkcí, které nám budou označovat restrikci funkcí na danou oblast. Bude se jednat zejména o omezení funkcí na oblast elementu - horní index e , případně na hranici elementu - horní index ∂e a podobně.

3.1.2 Oblast řešení a její rozklad

Oblast řešení budeme dále v textu označovat jako Ω , vzhledem k charakteru problému budeme předpokládat $\Omega \subset E_3$. O její hranici $\partial\Omega = \Gamma$ předpokládáme, že je lipschitzovská. Pro další úvahy je třeba rozložit oblast Ω na systém konečného počtu navzájem disjunktních oblastí, dále označovaných jako elementy. Předpokládáme, že hranice elementů tvoří po částech hladké plochy nebo křivky. Rozklad oblasti Ω označme symbolem E_h , kde h charakterizuje parametr diskretizace. Jednotlivé elementy označme e a hranice elementu ∂e . Na E_h klademe požadavky

$$\bar{\Omega} = \cup_{e \in E_h} \bar{e}. \quad (3.1.1)$$

Dále definujme množinu stěn rozkladu oddělujících jednotlivé podoblasti Γ_h , pro kterou platí

$$\Gamma_h = \cup_{e \in E_h} \partial e. \quad (3.1.2)$$

Množinu stěn rozkladu Γ_h dále rozdělíme na části, kde je zadána Dirichletova okrajová podmínka - Γ_D a části, kde není zadána Dirichletova okrajová podmínka - Γ , symbolicky zapsáno

$$\Gamma_h = \Gamma \cup \Gamma_D. \quad (3.1.3)$$

Již zavedené části hranice, na kterých je zadána Neumannova okrajová podmínka, resp. Newtonova okrajová podmínka značené Γ_N , resp. Γ_T budeme chápat jako podmnožinu množiny Γ . Stejně tak množinu stěn, kterými jsou elementy nižší dimenze spojeny kompatibilně (pojem bude vysvětlen dále) s elementy vyšší dimenze, kterou označíme jako Γ_C . Podmnožinou množiny Γ budeme chápat i množinu stěn, které tvoří hrany mezi elementy stejné dimenze, označenou jako Γ_E .

$$\Gamma_E \cup \Gamma_C \cup \Gamma_N \cup \Gamma_T \subset \Gamma \quad (3.1.4)$$

3.1.3 Prostory integrovatelných funkcí

U dále zmíněných prostorů funkcí předpokládáme integrovatelnost v Lebesgueově smyslu.

Prostor $\mathbf{L}^2(\Omega)$

Prostor $\mathbf{L}^2(\Omega)$ je základním prostorem, pomocí kterého budeme definovat další prostory. Veškeré odvození provedené dále bude realizováno na oblasti $\Omega \in E_3$, proto $\mathbf{L}^2(\Omega)$ definujeme jako

$$\mathbf{L}^2(\Omega) = L^2(\Omega) \times L^2(\Omega) \times L^2(\Omega) \quad (3.1.5)$$

a skalární součin v prostoru $\mathbf{L}^2(\Omega)$ je definovaný jako

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)_\Omega &= \int_\Omega \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 \, d\Omega, \\ \forall \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 &\in \mathbf{L}^2(\Omega). \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

Prostor $H^1(\Omega)$

Symbolem $H^1(\Omega)$ označíme Sobolevův prostor funkcí z $L^2(\Omega)$ takových, že na oblasti $\Omega \subset E_3$ existuje gradient, který patří do prostoru $\mathbf{L}^2(\Omega)$.

$$H^1(\Omega) = \{\varphi \in L^2(\Omega); \nabla \varphi \in \mathbf{L}^2(\Omega)\} \quad (3.1.7)$$

Skalární součin v prostoru $H^1(\Omega)$ zavedeme jako

$$\begin{aligned} (\varphi_1, \varphi_2)_{1,\Omega} &= \int_\Omega (\varphi_1 \varphi_2 + \nabla \varphi_1 \cdot \nabla \varphi_2) \, d\Omega, \\ \forall \varphi_1, \varphi_2 &\in H^1(\Omega). \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

Prostor $\mathbf{H}(\text{div}, E_h)$

Prostorem $\mathbf{H}(\text{div}, E_h)$ nazveme množinu funkcí z $\mathbf{L}^2(\Omega)$, jejichž divergence na všech elementech e rozkladu E_h patří do $L^2(e)$.

$$\mathbf{H}(\text{div}, E_h) = \{\mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(\Omega); \nabla \cdot \mathbf{v}^e \in L^2(e), \forall e \in E_h\} \quad (3.1.9)$$

Skalární součin v prostoru $\mathbf{H}(\text{div}, E_h)$ zavedeme jako

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)_{\text{div},e} &= \int_e (\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 + \nabla \cdot \mathbf{v}_1 \nabla \cdot \mathbf{v}_2) \, d\Omega, \\ \forall \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 &\in \mathbf{H}(\text{div}, E_h). \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

Prostor $H^{1/2}(\Gamma_h)$

Připomeňme množinu stěn rozkladu, kterou jsme označili jako Γ_h , vztah 3.1.2. Prostor $H^{1/2}(\Gamma_h)$ je množinou funkcí μ , které jsou stopou některé funkce z prostoru $H^1(\Omega)$.

$$H^{1/2}(\Gamma_h) = \{\mu : \exists \varphi \in H^1(\Omega), \mu = \gamma_0 \varphi\}, \quad (3.1.11)$$

kde γ_0 je operátorem stop. Skalární součin zavádíme jako

$$\begin{aligned} (\mu_1, \mu_2)_{\Gamma_h} &= \inf \{(\varphi_1, \varphi_2)_{1,\Omega}; \mu_1 = \gamma_0 \varphi_1; \mu_2 = \gamma_0 \varphi_2\} \\ \forall \mu_1, \mu_2 &\in H^{1/2}(\Gamma_h) \\ \forall \varphi_1, \varphi_2 &\in H^1(\Omega) \end{aligned} \quad (3.1.12)$$

3.1.4 Slabé řešení úlohy podzemního proudění

Na slabé řešení klademe požadavky, aby funkce stavových veličin splňovaly ve slabém smyslu Darcyho zákon i rovnici kontinuity na všech prvcích rozkladu E_h . Na struktuře stěn rozkladu Γ_h požadujeme splnění podmínek vyrovnané bilance toků.

Testováním rovnice Darcyho zákona na jednotlivých elementech vektorovými funkcemi $\mathbf{v}$ z prostoru $\mathbf{H}(\text{div}; E_h)$, získáme

$$\sum_{e \in E_h} (\mathbf{R}^e \mathbf{u}^e, \mathbf{v}^e)_e + \sum_{e \in E_h} (\nabla(p^e + z^e), \mathbf{v}^e)_e = 0. \quad (3.1.13)$$

Dále užijeme Greenovu větu a současně rozdělme množinu všech elementových stěn dle vztahu 3.1.3 na množinu vnějších stěn, kde je zadána Dirichletova okrajová podmínka Γ_D a na množinu stěn, kde není zadána Dirichletova okrajová podmínka Γ .

$$\begin{aligned} \sum_{e \in E_h} (\mathbf{R}^e \mathbf{u}^e, \mathbf{v}^e)_e - \sum_{e \in E_h} (p^e + z^e, \nabla \cdot \mathbf{v}^e)_e + \sum_{e \in E_h} \langle \lambda^e + z^e, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma} = \\ - \sum_{e \in E_h} \langle p_D^e + z^e, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_D}, \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

kde symbol λ označuje stopu tlakové výšky na stěnách rozkladu Γ oblasti Ω . Tím jsme získali soustavu rovnic, reprezentující slabé splnění Darcyho zákona se zahrnutím Dirichletových okrajových podmínek na všech elementech rozkladu E_h .

Dále budeme testovat rovnici kontinuity na jednotlivých elementech skalárními funkcemi φ z prostoru $\mathbf{H}^1(\Omega)$, získáme

$$\sum_{e \in E_h} (\nabla \cdot \mathbf{u}^e, \varphi^e)_e = \sum_{e \in E_h} (q^e, \varphi^e)_e. \quad (3.1.15)$$

Užitím Greenovy věty odvodíme integrální identitu zdrojového členu v rovnici kontinuity s realizací Newtonovy okrajové podmínky na stěnách rozkladu Γ_C

$$\begin{aligned} \sum_{e \in E_h} (\nabla \cdot \mathbf{u}^e, \varphi^e)_e &= - \sum_{e \in E_h} (\mathbf{u}^e, \nabla \varphi^e)_e + \sum_{e \in E_h} \langle \mathbf{u}^e \cdot \mathbf{n}^e, \varphi^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_C} \\ \sum_{e \in E_h} (\nabla \cdot \mathbf{u}^e, \varphi^e)_e &= \sum_{e \in E_h} \langle \mathbf{u}^e \cdot \mathbf{n}^e, \varphi^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_C} \\ \sum_{e \in E_h} (\nabla \cdot \mathbf{u}^e, \varphi^e)_e + \sum_{e \in E_h} \langle \sigma \lambda^e, \varphi^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_C} - \sum_{e \in E_h} \langle \sigma p^e, \varphi^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_C} &= 0 \end{aligned} \quad (3.1.16)$$

Tím jsme získali soustavu rovnic, reprezentující slabé splnění rovnice kontinuity na všech elementech rozkladu E_h a současně jsme odvodili způsob, jakým budeme realizovat kompatibilní propojení mezi elementy různých dimenzí. Zdrojový člen q v rovnici kontinuity může mít obecně v multidimenzionální MH-FEM strukturu

$$q = q_s + \hat{q} + \tilde{q}, \quad (3.1.17)$$

kde q_s je hustota interních zdrojů, $\hat{q}$ zdrojový člen vzniklý kompatibilním napojením elementů a $\tilde{q}$ zdrojový člen vzniklý nekompatibilním napojením elementů. Naše odvození se omezuje pouze na zdrojový člen, který realizuje kompatibilní napojení elementu různých dimenzí. Nekompatibilní napojení se realizuje podobným způsobem a případné interní zdrojové členy vystupují na pravé straně.

Dále budeme testovat rovnici kontinuity na systému stěn Γ_E , předpisy Neumannovy a Newtonovy okrajové podmínky na systému Γ_N resp. Γ_T . Testovacími funkcemi pro všechny tři případy budou skalární funkce μ z prostoru $H^{1/2}(\Gamma_h)$

$$\begin{aligned} \sum_{e \in E_h} \langle \mathbf{u}^e \cdot \mathbf{n}^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_E} &= 0 \\ \sum_{e \in E_h} \langle \mathbf{u}^e \cdot \mathbf{n}^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_N} &= \sum_{e \in E_h} \langle u_N^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_N} \\ \sum_{e \in E_h} \langle \mathbf{u}^e \cdot \mathbf{n}^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_T} + \sum_{e \in E_h} \langle \sigma \lambda^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_T} &= \sum_{e \in E_h} \langle \sigma p_T^e, \mu^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_T} \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

Tím jsme získali úplnou soustavu rovnic, která reprezentuje slabé splnění úlohy filtračního proudění na oblasti Ω . Tato integrodiferenciální soustava musí být

splněna pro libovolné trojice testovacích funkcí $(\mathbf{v}, \varphi, \mu)$ vybrané z prostoru $\mathbf{W}(\Omega) = \mathbf{H}(\text{div}; E_h) \times L_2(\Omega) \times H^{1/2}(\Gamma_h)$.

Definice 1

Řešením úlohy filtračního proudění nazveme trojice funkcí $(\mathbf{u}, p, \lambda)$ z prostoru $\mathbf{W}(\Omega) = \mathbf{H}(\text{div}; E_h) \times L_2(\Omega) \times H^{1/2}(\Gamma_h)$.

Vzniklou soustavu integrodiferenciálních rovnic budeme dále diskretizovat a odvodíme soustavu lineárních rovnic.

3.1.5 Aproximační prostory funkcí

Aproximaci trojice stavových veličin $(\mathbf{u}, p, \lambda)$ budeme hledat jako lineární kombinaci báze funkcí z vhodně zvoleného konečnědimenzionálního podprostoru prostoru $\mathbf{H}(\text{div}; \Omega)$, $L_2(\Omega)$, $H^{1/2}(\Gamma_h)$. Těmito prostory pro nás budou $\mathbf{RT}_{-1}^0(E_h)$, $M^0(E_h)$, $M^0(\Gamma_h)$.

Raviart-Thomasův prostor $\mathbf{RT}_{-1}^0(E_h)$ je definován jako lineární obal konečné báze tvořené po částech lineárními funkcemi (lineárními na každém elementu e). Na zvolené podoblasti e bude mít i -tá funkce následující tvar

$$\mathbf{v}_i^e = k_i^e \begin{pmatrix} x - \alpha_{0i}^e \\ y - \alpha_{1i}^e \\ z - \alpha_{2i}^e \end{pmatrix}. \quad (3.1.19)$$

Naše odvození se omezuje na simplexové elementy, v takovém případě je počet funkcí, které získáme na každém elementu, dán počtem stěn u 3D elementů (hran u 2D elementu, uzlů u 1D elementů). Pro 3D elementy získáme 4 funkce, pro 2D elementy 3 funkce a pro 1D elementy 2 funkce. Koeficienty definovaných funkcí hledáme za podmínek

$$\int_{f_j} \mathbf{v}_i^e \cdot \mathbf{n}_j^e dS = \delta_{ij}, \quad (3.1.20)$$

kde f_j označuje j -tou stěnu elementu e a $\mathbf{n}_j$ je její jednotková vnější normála, δ_{ij} je Kroneckerův symbol. Požadujeme tedy splnění podmínky jednotkového toku každou částí hranice ∂e , která odděluje dva sousední elementy. Podmínka jednotkového toku funkcí $\mathbf{v}$ stěnami elementu 3.1.20 zajišťuje, aby neznámé u v diskretizované soustavě rovnic byly číselně rovny přetokům stěnami. Množinu indexů vektorových funkcí označíme I .

Prostory $L_2(\Omega)$ respektive $H^{1/2}(\Omega)$ budeme aproximovat pomocí prostorů $M^0(E_h)$ respektive $M^0(\Gamma_h)$ po částech konstantních funkcí - konstantních na

každém elementu $e \in E_h$ respektive na každé stěně oddělující dva elementy $f \in \Gamma_h$. Bázové funkce těchto prostorů můžeme popsat následovně:

$$\varphi_i^e(x) = \begin{cases} 1 & x \in e \wedge i = e \\ 0 & x \notin e \end{cases} \quad (3.1.21)$$

$$\mu_j^f(x) = \begin{cases} 1 & x \in f \wedge j = f \\ 0 & x \notin f \end{cases} \quad (3.1.22)$$

3.1.6 Generování bázových funkcí z prostoru $\mathbf{RT}_{-1}^0(E_h)$

Značení funkcí

V této části nebudeme pro jednodušší orientaci v zápisu uvádět horní indexy u funkcí. Zvýraznění příslušnosti k danému elementu zde není klíčové, neboť při odvozování se omezujeme vždy na jeden konkrétní element.

Předpoklad referenční polohy

Při odvození budeme u elementů předpokládat polohu na ose X , resp. v rovině XY . Tyto předpoklady můžeme uvažovat bez újmy na obecnosti, neboť pro každý element existuje afinní transformace $\mathcal{T}_e$, která element z obecné polohy (x, y, z) v prostoru $\mathbf{E}_3$ transformuje do referenční polohy (x_0, y_0, z_0) a obráceně, symbolicky zapsáno

$$\mathcal{T}_e : e(x, y, z) \rightarrow e(x_0, y_0, z_0) \quad (3.1.23)$$

Elementy nižších dimenzí

Při výpočtu funkcí pro 1D a 2D elementy, je třeba z důvodu zachování stejné fyzikální interpretace toků počítat i s doplňkovými dimenzemi prvků tak, aby každý prvek měl definovaný objem. Kdybychom neuvažovali doplňkové dimenze prvků, funkce by byly spočteny pro jednotkový průřez pro 1D prvky, případně pro jednotkové rozevření pro 2D prvky.

Liniový element

Vyjdeme ze vztahů 3.1.18 a 3.1.20, uvažujme liniový element s vrcholy $(x_0, 0, 0)$ a $(x_1, 0, 0)$ a průřezem S , přičemž $x_1 > x_0$. Hledejme koeficienty funkce $\mathbf{v}_0$ ve tvaru

$$\mathbf{v}_0 = k_0 \begin{pmatrix} x - \alpha_{00} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.1.24)$$

za podmínek

$$\int_{f_0} \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{n}_0 \, dS = 1 \quad \text{a} \quad \int_{f_1} \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{n}_1 \, dS = 0, \quad (3.1.25)$$

kde f_0 a f_1 jsou stěny elementu, které vyjádříme jako

$$\begin{aligned} f_0 : \quad & x = x_0, \quad y = 0, \quad z = 0 \\ f_1 : \quad & x = x_1, \quad y = 0, \quad z = 0 \end{aligned} \quad (3.1.26)$$

a vnější normálové vektory vyjádříme ve tvaru

$$\mathbf{n}_0 = S \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{n}_1 = S \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1.27)$$

Dosazením 3.1.24 a 3.1.27 do podmínek 3.1.25 a současného využití 3.1.26 získáme soustavu dvou rovnic o dvou neznámých. Pro liniový element integrální podmínky 3.1.25 přejdou v prostý součin. Získaná soustava rovnic má tvar

$$\begin{aligned} -k_0 x_0 S + k_0 \alpha_{00} S &= 1 \\ k_0 x_1 S - k_0 \alpha_{00} S &= 0. \end{aligned} \quad (3.1.28)$$

Bázové funkce liniového elementu mají pouze dva lineárně nezávislé koeficienty. Řešení soustavy má tvar

$$\mathbf{v}_0 : \quad k_0 = \frac{1}{S(x_1 - x_0)}, \quad \alpha_{00} = x_1. \quad (3.1.29)$$

Všimněme si, že člen $S(x_1 - x_0)$ má význam objemu elementu. Pro odvození koeficientů funkce $\mathbf{v}_1$ bychom použili stejný postup a uvedeme si proto již pouze hodnoty koeficientů

$$\mathbf{v}_1 : \quad k_1 = \frac{1}{S(x_1 - x_0)}, \quad \alpha_{01} = x_0. \quad (3.1.30)$$

Trojúhelníkový element

Vyjdeme opět ze vztahů 3.1.18 a 3.1.20, uvažujme trojúhelníkový element s vrcholy $(x_0, y_0, 0)$, $(x_1, y_1, 0)$, $(x_2, y_2, 0)$ a rozevřením L . Hledejme koeficienty funkce $\mathbf{v}_0$ ve tvaru

$$\mathbf{v}_0 = k_0 \begin{pmatrix} x - \alpha_{00} \\ y - \alpha_{10} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.1.31)$$

za podmínek

$$\int_{f_0} \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{n}_0 \, dS = 1, \quad \int_{f_1} \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{n}_1 \, dS = 0, \quad \int_{f_2} \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{n}_2 \, dS = 0, \quad (3.1.32)$$

kde f_0 , f_1 a f_2 jsou stěny elementu, které vyjádříme parametrickými rovnicemi jako

$$\begin{aligned} f_0 : \quad & x = x_0 + (x_1 - x_0)t, & y = y_0 + (y_1 - y_0)t, & z = 0 \\ f_1 : \quad & x = x_1 + (x_2 - x_1)t, & y = y_1 + (y_2 - y_1)t, & z = 0 \\ f_2 : \quad & x = x_2 + (x_0 - x_2)t, & y = y_2 + (y_0 - y_2)t, & z = 0 \end{aligned} \quad (3.1.33)$$

přičemž předpokládáme $\forall t \in \langle 0, 1 \rangle$. Vnější normálové vektory vyjádříme ve tvaru

$$\mathbf{n}_0 = L \begin{pmatrix} y_1 - y_0 \\ x_1 - x_0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{n}_1 = L \begin{pmatrix} y_2 - y_1 \\ x_2 - x_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{n}_2 = L \begin{pmatrix} y_0 - y_2 \\ x_0 - x_2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.1.34)$$

Dosazením 3.1.31 a 3.1.34 do podmínek 3.1.32 a současného využití 3.1.33 získáme soustavu tří rovnic o třech neznámých. Na rozdíl od 1D liniového elementu integrální podmínky 3.1.32 již nepřechází v prostý součin. Získaná soustava rovnic má tvar

$$\begin{aligned} k_0 L [x_0 y_1 - x_1 y_0 + \alpha_{00}(y_1 - y_0) + \alpha_{10}(x_0 - x_1)] &= 1 \\ k_0 L [x_1 y_2 - x_2 y_1 + \alpha_{00}(y_2 - y_1) + \alpha_{10}(x_1 - x_2)] &= 0 \\ k_0 L [x_2 y_0 - x_0 y_2 + \alpha_{00}(y_0 - y_2) + \alpha_{10}(x_2 - x_0)] &= 0 \end{aligned} \quad (3.1.35)$$

Situace je podobná jako u liniového elementu, báze funkce trojúhelníkového elementu mají tři lineárně nezávislé koeficienty. Řešení soustavy je ve tvaru

$$\mathbf{v}_0 : \quad k_0 = \frac{1}{DL}, \quad \alpha_{00} = x_2, \quad \alpha_{10} = y_2, \quad (3.1.36)$$

kde

$$D = x_0y_1 - x_1y_0 + x_1y_2 - x_2y_1 + x_2y_0 - x_0y_2. \quad (3.1.37)$$

Polynomiální výraz D je číselně roven dvojnásobku plochy elementu. Pro odvození koeficientů funkcí $\mathbf{v}_1$ a $\mathbf{v}_2$ bychom použili opět shodný postup a uvedeme si proto již jen hodnoty koeficientů jednotlivých funkcí

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 : \quad k_1 &= \frac{1}{DL}, & \alpha_{01} &= x_0, & \alpha_{11} &= y_0 \\ \mathbf{v}_2 : \quad k_2 &= \frac{1}{DL}, & \alpha_{02} &= x_1, & \alpha_{12} &= y_1 \end{aligned} \quad (3.1.38)$$

Pro 3D simplexový element - čtyřstěn, není třeba zahrnovat do výpočtu doplňující dimenze. Z důvodu rozsahu práce a shodného postupu jako u elementů nižších dimenzí nebude odvození provedeno.

3.1.7 Diskretizace modelu

Pro potřeby popisu vytvoření globální matice zavedeme následující indexové označení. Indexovou množinu všech elementů označíme J , indexovou množinu všech mezelementových i vnějších stěn označíme K , její podmnožinu tvoří množina indexů vnitřních mezelementových stěn, značená symbolem K_E a indexové množiny vnějších stěn, na kterých jsou zadány postupně Dirichletovy, Neumannovy respektive Newtonovy okrajové podmínky, označíme symboly K_D, K_N, K_T . Následující oddíl bude popisovat, jakým způsobem se generují globální matice pro systémy elementů jednotlivých dimenzí (3D,2D,1D). Indexovými množinami s dolním indexem d budeme označovat jejich restrikcí na systém dané dimenze. Elementy a elementové stěny budeme číslovat relativně vůči systému dané dimenze, tento přístup nám ulehčí popis sestavení globálních matic jednotlivých systémů.

Slabé řešení úlohy proudění budeme hledat ve formě lineární kombinace bázových funkcí ve tvaru

$$\mathbf{u}_h(\mathbf{x}) = \sum_{i \in I} U_i \mathbf{v}_i(\mathbf{x}), \quad p_h(\mathbf{x}) = \sum_{j \in J} P_j \varphi_j(\mathbf{x}), \quad \lambda_h(\mathbf{x}) = \sum_{k \in K} \Lambda_k \mu_k(\mathbf{x}). \quad (3.1.39)$$

Dosazením uvedených vztahů (3.1.39) do systému integrálních rovnic (3.1.18), odvodíme pro bázové a testovací funkce soustavu lineárních algebraických rovnic.

Integrální formu $(\mathbf{R}^e \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)_e$ označíme A_{ij}^e . Dostaneme blokovou matici $\mathbf{A}^e$, jejíž prvky jsou nenulové pouze tehdy, jsou-li zvolené indexy i, j indexy vektorových funkcí, jejichž supportem je element e . Prvky jednotlivých bloků matice vypočteme následujícím způsobem

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}^e]_{ij} &= \int_e [\mathbf{v}_i^e]^T \mathbf{R}^e [\mathbf{v}_j^e] dV = \\ &= k_i^e k_j^e \int_e (x - \alpha_{0i}^e \quad y - \alpha_{1i}^e \quad z - \alpha_{2i}^e) \mathbf{R}^e \begin{pmatrix} x - \alpha_{0j}^e \\ y - \alpha_{1j}^e \\ z - \alpha_{2j}^e \end{pmatrix} dV. \end{aligned} \quad (3.1.40)$$

Kompozicí jednotlivých bloků získáme blokově diagonální matici. Velikost bloku příslušícího jednotlivým elementům je dán dimenzí prostoru vektorových funkcí definovaných na daném elementu. U uvažovaných simplexových prvků má blok $\mathbf{A}^e$ rozměr 4×4 pro 3D prvky (čtyřstěny), 3×3 pro 2D prvky - trojúhelníky a 2×2 pro 1D liniové prvky. Výsledná matice má pro systém dimenze d rozměr $|I_d| \times |I_d|$.

Integrální formu $-(\varphi_i, \nabla \cdot \mathbf{v}_j)_e$ označíme $\mathbf{B}_{ij}^e$. Dostaneme blokovou matici $\mathbf{B}^e$, jejíž prvky jsou nenulové v případě, když funkce φ_i a $\mathbf{v}_j$ mají support na elementu e . V tomto případě bude $\mathbf{B}_{ij}^e = -1$. To plyne z definice funkce φ_i (vztah 3.1.21) a z vlastnosti vektorové funkce $\mathbf{v}_j^e$ (vztah 3.1.20). V ostatních případech bude souřadnice rovna nule. Řádkové velikosti jednotlivých $\mathbf{B}^e$ jsou dány opět dimenzí prostoru vektorových funkcí definovaných na daném elementu, sloupcový rozměr je vždy 1. Hodnoty určíme následovně

$$-\int_e \varphi^e \nabla \cdot \mathbf{v}_j^e dV = -\int_e \nabla \cdot \mathbf{v}_j^e dV = -1 \quad (3.1.41)$$

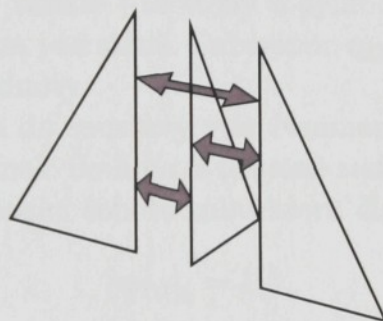
Tedy $\mathbf{B}^e = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$ pro čtyřstěn, $\mathbf{B}^e = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$ pro trojúhelník a $\mathbf{B}^e = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$ pro liniový prvek.

Kompozicí jednotlivých subbloků sestavíme blok $\mathbf{B}$, jehož rozměr je $|I_d| \times |J_d|$. Tento blok se sestává z diagonálních subbloků o rozměrech 4×1 pro čtyřstěn, 3×1 pro trojúhelník a 2×1 pro liniový prvek.

Integrální formu $\langle \mu_i, \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e}$ označíme $C_{ij}^{\partial e}$. Získáme blokovou matici $\mathbf{C}^{\partial e}$, jejíž prvky jsou nenulové v případě, když funkce μ_i má support na stěně f_j elementu e a $\mathbf{v}_j$ má support na elementu e a realizuje jednotkový přetok stěnou f_j . V tomto případě bude $\mathbf{C}_{ij}^{\partial e} = 1$. Plyne to z definice funkce μ_i (vztah 3.1.22)

a z vlastnosti vektorové funkce $\mathbf{v}_j$ (vztah 3.1.20). V ostatních případech bude souřadnice $\mathbf{C}_{ij}$ rovna nule.

Blok $\mathbf{C}$ má rozměr $|I_d| \times |K_d|$, kde K_d označuje indexovou množinu všech vnitřních a okrajových stěn (resp. hran u 2D prvků resp. uzlů u 1D prvků), na nichž není zadána Dirichletova okrajová podmínka. U sítě složené ze čtyřstěnů každý sloupec reprezentuje jednu stěnu. Pokud se jedná o vnitřní stěnu, bude sloupec obsazen právě dvěma jedničkami na pozicích, které odpovídají indexům básových vektorových funkcí, které realizují jednotkový tok právě touto stěnou. Na ostatních pozicích tohoto sloupce budou nuly. Jedná-li se o okrajovou stěnu, bude ve sloupci pouze jedna jednička na pozici indexu básové funkce, která definuje jednotkový tok zmíněnou stěnou. Podobně je tomu i u puklinové sítě složené z trojúhelníků respektive liniové sítě složené z úseček. Rozdíl je pouze v tom, že vnitřní hrany mohou ve 3D prostoru sousedit s více prvky, jak ukazuje obrázek 3.1. Proto ve sloupcích, odpovídajících uvedeným vnitřním hranám nebo uzlům, může být i více jedniček než dvě.



Obrázek 3.1: Sousednost puklinové sítě ve 3D

Indexovou množinu K_d rozdělíme do dvou podmnožin $K_d = K_d^0 \cup K_d^\partial$ vnitřních a okrajových stěn, na kterých není zadána Dirichletova okrajová podmínka. Potom můžeme matici $\mathbf{C}$ znázornit schématem:

$$\mathbf{C}_d = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_d^0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}_d^\partial \end{pmatrix} \quad (3.1.42)$$

Blok $\mathbf{T}_d$ má rozměr $|K_d| \times |K_d|$ a je diagonální. Užijeme-li zavedenou symboliku, můžeme blok $\mathbf{T}_d$ znázornit

$$\mathbf{T}_d = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T}_d^\partial \end{pmatrix} \quad (3.1.43)$$

Na diagonále vnitřních stěn je nula, stejně tak jako na pozicích okrajových stěn, na kterých je zadána Neumannova okrajová podmínka. Na diagonálních

pozicích, které náleží okrajovým stěnám s Newtonovou okrajovou podmínkou, jsou odpovídající přechodové koeficienty se záporným znaménkem. Tedy na k -té „Newtonově“ stěně je číslo $-\sigma_k S_k$, kde S_k označuje plochu k -té stěny.

V uvedené interpretaci lze formálně soustavu systému určité dimenze zapsat ve tvaru následujících lineárních algebraických rovnic

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_d & \mathbf{B}_d & \mathbf{C}_d \\ \mathbf{B}_d^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_d^T & \mathbf{0} & \mathbf{T}_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_d \\ \mathbf{P}_d \\ \mathbf{\Lambda}_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{Dd} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{q}_{Td} \end{pmatrix}. \quad (3.1.44)$$

Na pravé straně soustavy (3.1.44) jsou dva subvektory $\mathbf{q}_{Dd}$, $\mathbf{q}_{Td}$. Subvektor $\mathbf{q}_{Dd}$ zadává do soustavy vliv Dirichletových okrajových podmínek. Na j -té pozici tohoto subvektoru je číslo vypočtené ze vztahu

$$[\mathbf{q}_{Dd}]_j = -Z_T^j - P_D^j, \quad (3.1.45)$$

kde symbol Z_T^j vyjadřuje těžiště j -té stěny a symbol P_D^j je hodnota Dirichletovy okrajové podmínky na j -té stěně. Subvektor $\mathbf{q}_{Dd}$ má délku $|I_d|$ a na $|K_{Dd}|$ pozicích jsou nenulové hodnoty.

Subvektor $\mathbf{q}_{Td}$ zadává do soustavy vliv Neumannových respektive Newtonových okrajových podmínek. Je-li na k -té stěně zadána Neumannova okrajová podmínka, bude na k -té pozici tohoto subvektoru číslo

$$[\mathbf{q}_{Td}]_k = U_N^k, \quad (3.1.46)$$

kde U_N^k zadává hodnotu vnějšího toku na této stěně. Pokud je na k -té stěně zadána Newtonova okrajová podmínka, dosadíme na k -tou souřadnici subvektoru číslo

$$[\mathbf{q}_{Td}]_k = -\sigma^k P_N^k S_k, \quad (3.1.47)$$

kde σ_k zadává koeficient přechodu na této stěně, P_N^k zadává hodnotu tlakové výšky na této stěně a S_k označuje plochu k -té stěny. Subvektor $\mathbf{q}_{Td}$ má délku $|K_d|$ a obecně na $|K_{Td}| + |K_{Nd}|$ pozicích mohou být nenulové hodnoty.

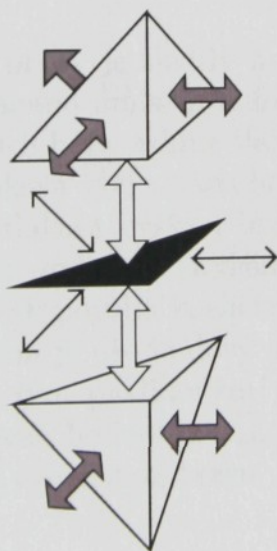
Zatím jsme však neuvažovali propojení systémů jednotlivých dimenzí, uvažujeme-li multidimenzionální model s 3D, 2D i 1D prvky, máme tři separátní soustavy ve tvaru 3.1.44, jejich propojením se budeme zabývat v dalším oddílu.

3.1.8 Multidimenzionální model

Výrazné nehomogenity v horninovém prostředí nás vedly k separátnímu popisu kompaktních bloků, puklin i vrtů. V případě, že bychom modelovali veškeré útvary pomocí různě velkých 3D prvků, vznikaly by komplikace s regularitou

sítě. Prvky nižších dimenzí preferují toky definované svojí polohou, což odpovídá charakteru puklin a současně redukuje oproti použití 3D prvků i počet neznámých. Myšlenka užití prvků více dimenzí řeší problémy s regularitou sítě, staví nás však před problém navázání komunikace mezi jednotlivými systémy. Nejednoznačnost interpretace nastává v případě, kdy prvek nižší dimenze netvoří hranici mezi prvky dimenze vyšší a dochází například k jejich protínání. V takovém případě již není problematické stanovit pouze koeficient přestupu σ ale i plochu S , kterou je realizován tok mezi elementy. Naskytá se řešení kolidující elementy vyšší dimenze odstranit, v takovém případě jsme postaveni před problém, jakým způsobem navázat sousednosti. Souslednosti (modely), kdy prvky nižší dimenze tvoří rozhraní mezi prvky vyšší dimenze, nazýváme kompatibilními a v opačném případě souslednosti nazýváme nekompatibilními. Stavba nekompatibilního modelu je náročnější a je vhodné se ji v případě možné volby vyhnout. Pomocí nekompatibilních sousledností je vhodné realizovat například vrt. Dále se budeme zabývat popisem tvorby zejména kompatibilních modelů, kdy 3D prvky budeme chápat jako bloky skalního masivu, 2D prvky budou představovat puklinové systémy a 1D prvky průsečnice puklinových systémů.

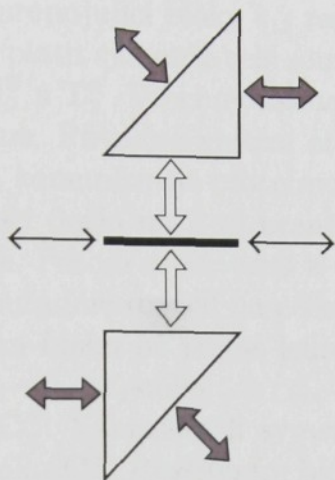
Situace znázorněná na obrázku 3.2 představuje kompatibilní napojení 3D a 2D prvků. Kdy je mezi dva objemové prvky vložena stěna, která je součástí puklinové sítě a může tedy odvádět část podzemní vody do propojeného systému puklin nebo naopak přivádět vodu do objemových prvků.



Obrázek 3.2: Napojení 3D a 2D prvků

Realizace napojení 2D a 1D prvků je realizována stejným způsobem jako napojení 3D prvků a 2D prvků, s rozdílem, že na oblasti $\Omega \subset E_3$ může 1D

prvek sousedit s více 2D prvky. Při komunikaci 1D a 2D prvků mohou též vznikat nejasnosti s interpretací velikostí přestupové plochy, která je u komunikace 2D a 3D prvků definována jednoznačně. Detailněji si proto popíšeme tento obecnější způsob napojení 2D a 1D prvků. Situace je znázorněna na obrázku 3.3. Nechť mezi dva puklinové prvky je vložena hrana, která je součástí liniové sítě a může tedy odvádět část podzemní vody do propojeného systému liniových prvků nebo naopak přivádět vodu do puklinového systému.



Obrázek 3.3: Napojení 2D a 1D prvků

Způsob komunikace mezi prvky je závislý na tlakové výšce v těžištích navazujících hran. Je-li mezi hranami umístěn liniový prvek, potom jsou původní hrany okrajové a mohou na nich být rozdílné tlakové výšky. Nechť tedy na hranách puklinových prvků je tlaková výška dána hodnotami $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ a mezi nimi leží liniový prvek, jehož tlaková výška v těžišti je dána hodnotou p , nechť dále mezi prvním puklinovým prvkem a prvkem liniovým je přechodový stav charakterizován hodnotou přestupového koeficientu σ_1 , mezi druhým puklinovým prvkem a prvkem liniovým je přechodový stav charakterizován hodnotou σ_2 a tak dále. Tedy mezi m -tým puklinovým prvkem a prvkem liniovým je přechodový stav charakterizován hodnotou σ_m . Potom okrajové podmínky na sledovaném rozhraní můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 = \sigma_1 (\lambda_1 - p), \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 = \sigma_2 (\lambda_2 - p), \dots, \mathbf{u}_m \cdot \mathbf{n}_m = \sigma_m (\lambda_m - p). \quad (3.1.48)$$

Tyto podmínky vytvoří modifikace v původně odvozených soustavách pro síť puklinových a liniových prvků, které jsme zapsali do jedné kombinované soustavy. Dolní index u jednotlivých subbloků v matici symbolizuje dimenzi systému, ke kterému se jednotlivé bloky vztahují.

$$\left(\begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccc} \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{C}_2^\# \\ \mathbf{B}_2^T & 0 & 0 \\ \mathbf{C}_2^{\#T} & 0 & \mathbf{T}_2^\# \end{array} \right) \\ \left(\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{t}_{21} \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{t}_{12} & 0 \end{array} \right) \\ \left(\begin{array}{ccc} \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{C}_1 \\ \mathbf{B}_1^T & \mathbf{d}_1 & 0 \\ \mathbf{C}_1^T & 0 & \mathbf{T}_1 \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (3.1.49)$$

Soustava je doplněna o propojující bloky $\mathbf{t}_{12}$ respektive $\mathbf{t}_{21}$, přičemž snadno z odvození uvidíme, že bude platit symetrie celé soustavy, speciálně, že $\mathbf{t}_{12} = \mathbf{t}_{21}^T$. Dále jsou upraveny bloky $\mathbf{C}_2^\#$ a $\mathbf{T}_2^\#$. Všechny naznačené úpravy jsou symetrické a nyní tyto úpravy popíšeme. Původně vnitřní stěny 2D prvků se zařazením 1D prvku staly okrajovými, komunikovat proto mohou jen s 1D prvkem. Předpokládejme, že k této situaci došlo na k -té hraně, která původně oddělovala $i_1, i_2, \dots, i_m$ puklinový prvek. Potom se původní k -tý sloupec bloku $\mathbf{C}_2$ obsahující celkem m nenulových souřadnic rozdělí na celkem m sloupců $k_1, k_2, \dots, k_m$, které budou mít v uvedeném bloku již pouze jednu nenulovou hodnotu (náležící příslušné pozici stěny i_1 -ního, i_2 -tého, $\dots$, i_m -tého prvku. Takto rozšířený blok $\mathbf{C}_2$ označujeme jako $\mathbf{C}_2^\#$. Vzhledem k symetrii celé soustavy se úprava promítne analogicky i do bloku $\mathbf{C}_2^T$. Rozšířením bloků $\mathbf{C}_2$ a $\mathbf{C}_2^T$ dojde současně i k expanzi bloku $\mathbf{T}_2$, který měl na původní k -té souřadnici na diagonále nulu. Úpravou v uvedené matici vznikne celkem $m \times m$ nových pozic. Takto rozšířený blok $\mathbf{T}_2$ označujeme jako $\mathbf{T}_2^\#$. Na mimodiagonálních pozicích budou nuly a na diagonálních vzniklých pozicích budou hodnoty

$$[\mathbf{T}_2^\#]_{k_1 k_1} = -\sigma_1 S_1, [\mathbf{T}_2^\#]_{k_2 k_2} = -\sigma_2 S_2, \dots, [\mathbf{T}_2^\#]_{k_m k_m} = -\sigma_m S_m, \quad (3.1.50)$$

což snadno získáme úpravou vztahu (3.1.48). Navíc do levého sousedícího bloku, který byl původně nulový, přibude nenulový příspěvek do bloku $\mathbf{t}_{12}$. Má-li liniový prvek index j , pak v bloku $\mathbf{t}_{12}$ budou nenulové souřadnice

$$[\mathbf{t}_{12}]_{k_1 j} = \sigma_1 S_1, [\mathbf{t}_{12}]_{k_2 j} = \sigma_2 S_2, \dots, [\mathbf{t}_{12}]_{k_m j} = \sigma_m S_m. \quad (3.1.51)$$

Určení plochy přestupu není v případě komunikace 2D a 1D prvků jednoznačné. Budeme uvažovat, že plocha přestupu se řídí prvkem vyšší dimenze. Touto úpravou jsme do modelu zahrnuli skutečnost, že ze 2D bloků může být část vody odváděna vloženým liniovým prvkem. Nyní musíme tuto skutečnost zahrnout i do liniového systému. Uvedené vnější přetoky z puklinového systému tvoří v j -tém liniovém elementu zdroj. Tento zdroj se promítne do střední blokové části liniového systému následujícím způsobem:

Na j -tý řádek bloku $\mathbf{t}_{21}$ do pozic $k_1, k_2, \dots, k_m$ sloupců zapíšeme hodnoty $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m$. Tedy

$$[\mathbf{t}_{21}]_{jk_1} = \sigma_1 S_1, [\mathbf{t}_{21}]_{jk_2} = \sigma_2 S_2, \dots, [\mathbf{t}_{21}]_{jk_m} = \sigma_m S_m. \quad (3.1.52)$$

Současně je zřejmé, že platí $\mathbf{t}_{12} = \mathbf{t}_{21}^T$.

Dále na j -tou diagonální pozici bloku $\mathbf{d}_1$ zapíšeme zápornou hodnotu součtu $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m$ násobené velikostí plochy příslušné stěny.

$$[\mathbf{d}_1]_{jj} = - \sum_{k=1}^m \sigma_k S_k. \quad (3.1.53)$$

Výše uvedené úpravy jsou realizací Newtonovy okrajové podmínky. Nyní si uvedeme stavovou rovnici multidimenzionálního modelu, který kombinuje 3D, 2D i 1D prvky.

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_3 & \mathbf{B}_3 & \mathbf{C}_3 \\ \mathbf{B}_3^T & 0 & 0 \\ \mathbf{C}_3^T & 0 & \mathbf{T}_3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{t}_{23} & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{t}_{32} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{C}_2 \\ \mathbf{B}_2^T & \mathbf{D}_2 & 0 \\ \mathbf{C}_2^T & 0 & \mathbf{T}_2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{t}_{12} & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{t}_{12} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{C}_1 \\ \mathbf{B}_1^T & \mathbf{D}_1 & 0 \\ \mathbf{C}_1^T & 0 & \mathbf{T}_1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}.$$

Jsou-li v horninovém prostředí budovány systémy tunelů nebo vrtů, je vhodné uvažovat model, který propojuje i 3D prvky a 1D prvky, případně i model, který uvažuje libovolné nekompatibilní propojení. Odvození by se provádělo podobným způsobem jako u kompatibilního propojení. Model pro tyto situace však není ještě kalibrován, a proto se nebudeme dále jeho popisem zabývat.

3.2 Matematická formulace úlohy transportu

3.2.1 Metoda rozkladu operátoru - OS

Rozdílný charakter jednotlivých fyzikálních procesů přináší komplikace se stabilitou řešení v případě použití jedné metody. S přibývajícím počtem uvažovaných procesů tak i neúměrně roste nežádoucí časová náročnost výpočtu. Způ-

sob, jakým je možné komplikacím předejít, popisuje metoda rozkladu operátoru, jejíž myšlenku si před aplikací na náš problém advekce-disperze-výměna-sorpce (ADXS) ukážeme na jednoduché úloze. Předpokládejme již diskretizovaný systém obyčejných diferenciálních rovnic, který vznikl pomocí diskretizace spojitého prostoru pomocí např. MKD nebo MKP, ve tvaru $\mathbf{u}_t = \mathbf{S}\mathbf{u}$, kde $\mathbf{u}^T = (u_1(t), \dots, u_n(t))$, $\mathbf{S}$ je matice $n \times n$ a dolní index t symbolizuje 1. časovou derivaci. Pro jednoduchost předpokládejme explicitní Eulerovu diferenci, systém získáme ve tvaru

$$\frac{\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n}{\Delta t} = \mathbf{S}\mathbf{u}_n + O(\Delta t), \quad (3.2.1)$$

tedy

$$\mathbf{u}_{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{S})\mathbf{u}_n + O(\Delta t^2). \quad (3.2.2)$$

Matice $\mathbf{S}$ je diskretizací původního spojitého operátoru (součtu operátorů), v takovém případě vždy existuje jednoznačný rozklad ve tvaru

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^m \mathbf{S}_i, \quad (3.2.3)$$

kde $\mathbf{S}_i$ jsou diskretizace dílčích operátorů. Dosazením vztahu 3.2.3 do 3.2.2 získáme

$$\mathbf{u}_{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \sum_{i=1}^m \mathbf{S}_i)\mathbf{u}_n + O(\Delta t^2). \quad (3.2.4)$$

Použijeme Einsteinovu sumaci a provedeme úpravu

$$\mathbf{u}_{n+1} = \underbrace{\prod_{i=1}^m (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{S}_i)}_{\text{skládání operátorů}} \mathbf{u}_n + \underbrace{\Delta t^2 (1 - \delta_{ij}) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \mathbf{u}_n}_{O(\Delta t^2)} + O(\Delta t^2), \quad (3.2.5)$$

přičemž členy s mocninou Δt vyšší než 2 jsou shora omezeny uvažovaným řádem přesnosti metody - $O(\Delta t^2)$, a proto nejsou rozepisovány. Produkt $\prod_{i=1}^m (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{S}_i)$ odpovídá m po sobě jdoucím krokům Eulerovy explicitní metody. Ve skutečnosti se jedná o jeden krok a postupnou aplikaci m dynamických vlastností. Z 3.2.5 plyne, že chyba při metodě rozkladu operátoru vzroste, ale její řád zůstává na hodnotě $O(\Delta t^2)$. Abychom mohli metodu rozkladu operátoru aplikovat regulérním způsobem, musíme dodržet podmínku dostatečně malého časového kroku, tak aby $O(\Delta t^2) \rightarrow 0$. Současně musí pro velikost časového kroku platit podmínka

$$\Delta t < \Delta t_i; \quad \forall i \in (1, \dots, m), \quad (3.2.6)$$

kde Δt_i je omezení časového i -tým operátorem (procesem), kterým může být například splnění CFL podmínky pro operátor advekce. Při splnění těchto podmínek můžeme původní superpozici operátorů aproximovat ve smyslu metody rozkladu operátoru skladbou operátorů ze vztahu 3.2.5.

3.2.2 Definice OS pro ADXS problém

Soustava 2.3.20 vede na dva neznámé vektory o velikosti 2×1

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_m \\ c_i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s} = \begin{pmatrix} s_m \\ s_i \end{pmatrix}. \quad (3.2.7)$$

Rovnici před aplikací metody rozkladu operátoru zapíšeme schématicky jako

$$\frac{\partial \mathcal{I}(\mathbf{c})}{\partial t} = \mathcal{A}(\mathbf{c}) + \mathcal{D}(\mathbf{c}) + \mathcal{X}(\mathbf{c}) - \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{c})}{\partial t}, \quad (3.2.8)$$

kde $\mathcal{I}$ je operátorem identity, $\mathcal{A}$ je operátorem advekce, $\mathcal{D}$ operátorem disperze, $\mathcal{X}$ operátorem výměny a $\mathcal{F}$ operátorem sorpce. Symbolem $\mathcal{S}$ označíme operátor sorpční rovnováhy, pro který platí $\mathcal{S}^{-1} = \mathcal{I} + \mathcal{F}$. Jednotlivé členy rovnice 3.2.8 mají tvar

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\mathbf{c}) &= \begin{pmatrix} -\nabla \cdot (\mathbf{v} c_m) \\ 0 \end{pmatrix}, & \mathcal{D}(\mathbf{c}) &= \begin{pmatrix} \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_m) \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{X}(\mathbf{c}) &= \begin{pmatrix} \frac{\alpha}{n_m}(c_i - c_m) \\ -\frac{\alpha}{n_i}(c_i - c_m) \end{pmatrix}, & \mathcal{F}(\mathbf{c}) &= \begin{pmatrix} f_m(c_m) \\ f_i(c_i) \end{pmatrix}, \\ \mathcal{I}(\mathbf{c}) &= \begin{pmatrix} c_m \\ c_i \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

Dále zavedeme operátor $\mathcal{C}_{\mathbf{p}}$ nad proměnnými $\mathbf{c}, \mathbf{s}$ ve tvaru

$$\mathcal{C}_{\mathbf{p}}(\mathbf{c}, \mathbf{s}) = \mathbf{c}_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} c_{pm} \\ c_{pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\int_{V_m} c_m dV + \int_{V_s} s_m dV)/V_m \\ (\int_{V_i} c_i dV + \int_{V_s} s_i dV)/V_i \end{pmatrix}. \quad (3.2.10)$$

Symbolem V_m označujeme objem mobilních pórů, V_i objem imobilních pórů a V_s je objemem pevné fáze. Operátorem budeme určovat $\mathcal{C}_{\mathbf{p}}$ teoretickou celkovou koncentraci látky v mobilních/imobilních pórech se zahrnutím sorbovaného

množství látky, vztaženou na objem daného systému pórů. Pomocí těchto teoretických celkových koncentrací budeme určovat rovnováhu mezi látkou v póru a látkou sorbovanou.

Pro výpočet sorbovaného množství látky na objem pevné fáze zavedeme operátor $\mathcal{C}_s$ nad proměnnými $\mathbf{c}_e$ a $\mathbf{c}_p$ ve tvaru

$$\mathcal{C}_s(\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_e) = \begin{pmatrix} s_m \\ s_i \end{pmatrix} = \frac{1}{V_s} \begin{pmatrix} \int_{V_m} (c_{pm} - c_{em}) dV \\ \int_{V_i} (c_{pi} - c_{ei}) dV \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c}_e \begin{pmatrix} c_{em} \\ c_{im} \end{pmatrix}, \quad (3.2.11)$$

kde symbolem $\mathbf{c}_e$ označíme pomocný vektor vypočtených rovnovážných koncentrací v systémech mobilních a imobilních pórů, jeho výpočet si ukážeme dále.

Problém diskretizujeme a řešení *ADXS* problému metodou OS převedeme na dílčí úlohy. Necht' časový krok má velikost Δt , $n\Delta t = t_n$ a počáteční podmínka úlohy transportu je $\mathbf{c}_0 = \mathbf{c}(t_0, \mathbf{x})$. Jeden časový krok metodou rozkladu operátoru převedeme na posloupnost kroků s jednotlivými operátory. Vždy známé skalární pole koncentrací a sorbovaného množství látky z předchozího časového kroku

$$\mathbf{c}_{\text{IC}}(t_{n+1}, \mathbf{x}) = \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x}), \quad \mathbf{s}_{\text{IC}}(t_{n+1}, \mathbf{x}) = \mathbf{s}(t_n, \mathbf{x}), \quad (3.2.12)$$

tato skalární pole pro nás budou počáteční podmínky.

1) Výpočet advekce

Úkolem je nalézt řešení rovnice advekce s počáteční podmínkou ve tvaru 3.2.12 v čase $t = t_{n+1}$, postup řešení vyjádříme užitím Eulerovy zpětné difference jako

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{I}(\mathbf{c}) = \mathcal{A}(\mathbf{c}) \approx \frac{\mathbf{c}_{\mathbf{A}}(t_{n+1}, \mathbf{x}) - \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x})}{\Delta t} = \mathcal{A} \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x}). \quad (3.2.13)$$

Neznámé pole koncentrací po aplikaci operátoru advekce v čase $t = t_{n+1}$ můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\mathbf{c}_{\mathbf{A}}(t_{n+1}, \mathbf{x}) = \mathcal{A}_{\Delta t} \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x}), \quad (3.2.14)$$

kde symbolem $\mathcal{A}_{\Delta t}$ označíme součet operátorů $\mathcal{A}\Delta t + \mathcal{I}$.

2) Výpočet disperze

Jako počáteční podmínka pro rovnici disperze pro nás bude skalární pole koncentrací po aplikaci operátoru advekce $\mathbf{c}_{\mathbf{A}}(t_{n+1}, \mathbf{x})$ ze vztahu 3.2.14. Úkolem bude nalezení řešení rovnice disperze v čase $t = t_{n+1}$, postup řešení vyjádříme užitím Eulerovy zpětné difference jako

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{I}(\mathbf{c}) = \mathcal{D}(\mathbf{c}) \approx \frac{\mathbf{c}_{\mathbf{AD}}(t_{n+1}, \mathbf{x}) - \mathcal{A}_{\Delta t} \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x})}{\Delta t} = \mathcal{D} \mathcal{A}_{\Delta t} \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x}). \quad (3.2.15)$$

Neznámé pole koncentrací po aplikaci operátoru disperze v čase $t = t_{n+1}$ můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\mathbf{c}_{AD}(t_{n+1}, \mathbf{x}) = \mathcal{D}_{\Delta t} \mathcal{A}_{\Delta t} \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x}), \quad (3.2.16)$$

kde symbolem $\mathcal{D}_{\Delta t}$ označíme součet operátorů $\mathcal{D}\Delta t + \mathcal{I}$.

3) Výpočet výměny

Jako počáteční podmínka pro rovnici výměny pro nás bude skalární pole koncentrací po aplikaci operátorů advekce, disperze $\mathbf{c}_{AD}(t_{n+1}, \mathbf{x})$ ze vztahu 3.2.16. Úkolem bude nalezení řešení rovnice výměny v čase $t = t_{n+1}$, postup řešení vyjádříme užitím Eulerovy zpětné difference jako

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{I}(\mathbf{c}) = \mathcal{X}(\mathbf{c}) \approx \frac{\mathbf{c}_{ADX}(t_{n+1}, \mathbf{x}) - \mathcal{D}_{\Delta t} \mathcal{A}_{\Delta t} \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x})}{\Delta t} = \mathcal{X} \mathcal{D}_{\Delta t} \mathcal{A}_{\Delta t} \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x}). \quad (3.2.17)$$

Neznámé pole koncentrací po aplikaci operátoru výměny v čase $t = t_{n+1}$ můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\mathbf{c}_{ADX}(t_{n+1}, \mathbf{x}) = \mathcal{X}_{\Delta t} \mathcal{D}_{\Delta t} \mathcal{A}_{\Delta t} \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x}), \quad (3.2.18)$$

kde symbolem $\mathcal{X}_{\Delta t}$ označíme součet operátorů $\mathcal{X}\Delta t + \mathcal{I}$.

4) Výpočet sorpční rovnováhy

Úkolem bude nalezení řešení rovnice sorpční rovnováhy, pro skalární pole koncentrací po aplikaci operátorů advekce, disperze a výměny $\mathbf{c}_{ADX}(t_{n+1}, \mathbf{x})$ ze vztahu 3.2.18. Postup řešení vyjádříme schématicky jako

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{I}(\mathbf{c}) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}(\mathbf{c}) \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{S}^{-1}(\mathbf{c}) = 0, \quad (3.2.19)$$

časová změna součtu látky v póru a látky sorbované na povrchu póru je rovna nule. Obecně nelineární časově invariantní rovnici můžeme psát ve tvaru

$$\mathcal{S}^{-1}(\mathbf{c}_{ADXS}) = \text{const.} = \mathcal{C}_p(\mathcal{X}_{\Delta t} \mathcal{D}_{\Delta t} \mathcal{A}_{\Delta t} \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x}), \mathbf{s}(t_n, \mathbf{x})) = \mathbf{c}_p(t_n, \mathbf{x}), \quad (3.2.20)$$

její řešení můžeme pomocí operátoru sorpční rovnováhy $\mathcal{S}$ zapsat ve tvaru

$$\mathbf{c}_{ADXS}(t_{n+1}, \mathbf{x}) = \mathcal{S}(\mathcal{C}_p(\mathcal{X}_{\Delta t} \mathcal{D}_{\Delta t} \mathcal{A}_{\Delta t} \mathbf{c}(t_n, \mathbf{x}), \mathbf{s}(t_n, \mathbf{x}))). \quad (3.2.21)$$

$\mathbf{c}_{ADXS}(t_{n+1}, \mathbf{x}) = \mathbf{c}_e(t_{n+1}, \mathbf{x})$ je současně hledané skalární pole koncentrací v čase $t = t_{n+1}$ pro ADXS problém, které jsme určili posloupností čtyř uvedených kroků metodou rozkladu operátoru. Platí tedy

$$\mathbf{c}(t_{n+1}, \mathbf{x}) \equiv \mathbf{c}_{ADXS}(t_{n+1}, \mathbf{x}) \quad \mathbf{s}(t_{n+1}, \mathbf{x}) \equiv \mathcal{C}_s(\mathbf{c}_p(t_n, \mathbf{x}), \mathbf{c}_e(t_{n+1}, \mathbf{x}))$$

Jednotlivé fyzikální procesy budeme řešit metodami, které si popíšeme v další kapitole.

Kapitola 4

Numerické řešení

Tato kapitola se bude věnovat popisu realizace numerických metod, na jejichž základě je celý model postaven.

4.1 Řešení řídkých soustav rovnic

Rozsáhlé soustavy lineárních rovnic vzniklé diskretizací pomocí MH-FEM jsou často špatně podmíněné. Důvodem je zejména velký rozptyl velikosti jednotlivých prvků v blocích $\mathbf{A}$, který je způsoben nejen rozdílem velikostí elementů, ale i jejich rozdílnou hydraulickou vodivostí. Popsaná skutečnost má významný vliv na maximální dosažitelnou přesnost řešení a také na rychlost řešení v případě iteračních řešičů. Do jistých parametrů úlohy, které jsou závislé na jejím rozměru a struktuře, můžeme volit mezi přímým a iteračním řešičem, přičemž vhodně zvolený a nastavený iterační řešič je zpravidla rychlejší než řešič přímý. Přesnost takového řešení nemusí být shodná s přesností přímého řešiče. Je nutné uvažovat, že většina fyzikálních parametrů, které jsou vstupem pro výslednou matici, je určena s jistou tolerancí, případně na základě znaleckého odhadu. Znalost přesného řešení proto nemusí být pro daný problém nezbytně nutná. Úlohy z oblasti hydrogeologie jsou charakteristické rozsahlými řídkými maticemi. Iterační řešiče, na rozdíl od řešičů přímých, dokáží efektivně s řídkými strukturovanými maticemi pracovat, proto v úlohách hydrogeologie hrají významnou roli.

4.1.1 Předpodmínění

Metody předpodmínění řeší problém špatně podmíněných soustav, transformují původní problém na problém lépe řešitelný. Nejjednodušší typ předpodmínění vychází z aproximace matice soustavy $\mathbf{G}$ maticí $\bar{\mathbf{G}}$. Přičemž požadu-

jeme, aby výpočet inverze matice $\bar{\mathbf{G}}$ nebyl náročnější než řešení původní soustavy. Současně matice $\bar{\mathbf{G}}$ musí dobře aproximovat původní matici tak, aby $\|\mathbf{G} - \bar{\mathbf{G}}\| = \min$, aplikování popsaného předpokládání na soustavu $\mathbf{G}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ lze znázornit jako

$$\bar{\mathbf{G}}^{-1}\mathbf{G}\mathbf{x} = \bar{\mathbf{G}}^{-1}\mathbf{b}, \quad \bar{\mathbf{G}}^{-1}\mathbf{G} \approx \mathbf{I}, \quad (4.1.1)$$

kde $\mathbf{I}$ označuje jednotkovou matici. Vztah 4.1.1 znázorňuje přeskálování prvků původní matice, tedy transformaci na lépe podmíněný problém. Iterační metody vycházejí z minimalizace rezidua $\mathbf{r}$, které definujeme na již předpokládané soustavě jako

$$\mathbf{r} = \bar{\mathbf{G}}^{-1}\mathbf{G}\mathbf{x} - \bar{\mathbf{G}}^{-1}\mathbf{b}. \quad (4.1.2)$$

4.1.2 Iterační řešení symetrické indefinitní matice

Volba vhodné metody pro řešení symetrické indefinitní matice vzniklé diskretizační metodou MH-FEM závisí na dostupných prostředcích. Indefinitní matici s obecně 3mi sedlovými body můžeme transformovat metodou Schurova doplňku na symetrickou pozitivně definitní (SPD) matici. Pro řešení SPD problému jsou vyvinuty efektivní algoritmy souhrnně označované jako metody sdružených gradientů. Definici Schurova doplňku pro MH-FEM lze nalézt v [2]. Pro řešení indefinitního symetrického problému je vyvinuta metoda MINRES, která vychází z Krylovských podprostorů. Problematika řešení rozsáhlých soustav lineárních rovnic svým rozsahem přesahuje rámec této práce, a proto dále nebude rozváděna.

4.2 Metoda konečných objemů

Na konečné disjunktní množině rozkladu E_h oblasti Ω , jsme v předchozím oddílu vypočetli toky podzemní vody na jednotlivých elementech. Původní spojitě rozložení koncentrací na jednotlivých elementech nahradíme středními hodnotami

$$\begin{aligned} C_m^e &= \frac{1}{V_m^e} \int_{V_m^e} c_m dV, & C_i^e &= \frac{1}{V_i^e} \int_{V_i^e} c_i dV, \\ S_m^e &= \frac{1}{V_s^e} \int_{V_s^e} s_m dV, & S_i^e &= \frac{1}{V_s^e} \int_{V_s^e} s_i dV. \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

Symbolika značení je v souladu s předchozím zavedením. Koncentrace v pórech a sorbované množství látky na povrchu pórů spojitě rozložené na jednotlivých elementech jsme tímto přechodem nahradili jednou diskrétní hodnotou ve středu elementu (cell centered). Horními indexy v závorkách budeme dále označovat hodnoty koncentrací (případně látkových množství na objem pevné fáze) pro jednotlivé časové kroky. Například symbolem $C_m^{e(n)}$ budeme označovat střední hodnotu koncentrace v mobilním póru v n -tém časovém kroku v elementu e .

4.3 Řešení advekce

V tomto oddílu odvodíme explicitní numerické schéma pro řešení rovnice advekce s upwind schématem pro aproximaci toků.

Explicitní upwind schéma

Upwind schéma je charakteristickým diferenčním schématem pro orientované děje, tedy veškeré hyperbolické parciální diferenciální rovnice. Na děj nahlížíme proti jeho směru a tím způsobem vytváříme i diferenční schéma.

Definujme symboliku značení přetoků stěnami elementů, kdy pořadí indexů udává jejich směr

$$U_{jk} = \int_{\bar{e}_j \cap \bar{e}_k} \mathbf{v} \, d\mathbf{S}. \quad (4.3.1)$$

Splnění rovnice advekce v integrálním tvaru budeme požadovat na všech elementech rozkladu, tento požadavek zapíšeme ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_e c_m dV = - \int_{\partial e} c_m \mathbf{v} \, d\mathbf{S}. \quad (4.3.2)$$

Časovou derivaci v rovnici 4.3.2 aproximujeme dopřednou Eulerovou diferencí a využitím vztahů 4.2.1 můžeme výraz na levé straně rovnice zapsat ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_e c dV = \frac{\partial}{\partial t} C_m^e V^e \approx \frac{C_m^{e(n+1)} - C_m^{e(n)}}{\Delta t} V^e. \quad (4.3.3)$$

Pro zjednodušení definujeme znaménkovou konvenci ve smyslu upwind schématu pro integrandy v plošných integrálech přes mezelementové stěny sousedních elementů j, k .

$$\begin{aligned} C_m^{e_k} U_{kj} &\iff U_{kj} > 0 \quad [tok \ k \rightarrow j] \\ C_m^{e_j} U_{kj} &\iff U_{kj} < 0 \quad [tok \ j \rightarrow k] \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

Tímto zavedením jsme definovali symboliku, kdy vnější toky transportují látku z elementu do okolí a vnitřní toky transportují látku do elementu. Pro zjednodušení výsledného zápisu rovnice formálně definujeme pro k -tý element označení toku podle jejich směrů.

$$\begin{aligned} U_{jk}^+ &= U_{jk} \text{ pro } U_{jk} > 0 \\ U_{jk}^+ &= 0 \text{ pro } U_{jk} \leq 0 \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

Analogickým způsobem U_{jk}^-

Plošný integrál můžeme pomocí zavedené symboliky zapsat pomocí sumy středních hodnot toku a koncentrace na elementu k .

$$\int_{\partial e_k} c_m \mathbf{v} \, d\mathbf{S} = \sum_{j \in N_k} (U_{jk}^+ C_m^{e_k(n)} + U_{jk}^- C_m^{e_j(n)}) \quad (4.3.6)$$

Symbolem N_k označujeme množinu sousedních elementů vzhledem k elementu k . Tímto jsou již integrální výrazy na obou stranách rovnice převedeny do diskrétní formy a je možné zapsat výslednou rovnici, která má tvar (4.3.7).

$$C_m^{e_k(n+1)} = C_m^{e_k(n)} - \frac{\Delta t}{V e_k} \sum_{j \in N_k} (U_{jk}^+ C_m^{e_k(n)} + U_{jk}^- C_m^{e_j(n)}) \quad (4.3.7)$$

4.3.1 Stabilita upwind schématu

Upwind schéma pro rovnici advekce je podmíněně stabilní, je třeba dodržet podmínku, která předepisuje maximální velikost časového kroku. V případě nedodržení podmínky by nemusela být obecně splněna rovnice bilance hmoty, což by nastalo v situaci, kdy by z elementu nevytekl větší objem než je jeho vlastní (respektive v našem případě objem mobilních pórů). Podmínku nazýváme Courant-Friedrichs-Levi (CFL), dává do souvislosti velikost střední rychlosti toku stěnami s velikostí časové Δt a prostorové Δx diskretizace. Píšeme ji pro 1D případ ve tvaru

$$Cr = \frac{v \Delta t}{\Delta x} \leq 1, \quad (4.3.8)$$

kde Cr označuje Courantovo číslo. Ve 3D lze formulovat CFL podmínku jako

$$\frac{\Delta t \sum_{j \in N_k} U_{kj}^+}{V e_k} \leq 1 \quad \forall k \in E_h. \quad (4.3.9)$$

4.3.2 Numerická disperze

Vzhledem k užití diferenčních vzorců 1. řádu (v prostoru i čase) se dopouštíme chyby 2.řádu, o které lze rozvojem do Taylorovy řady a vyjádřením Lagrange-ova tvaru zbytku ukázat její ekvivalenci s vlastností disperzního členu. Pro 1D případ lze odvodit vztah pro numerickou disperzi ve tvaru

$$D_{num} = \frac{1}{2}v\Delta x(1 - Cr). \quad (4.3.10)$$

Není-li časový krok výpočtu nastaven tak, aby $Cr = 1$ (mez stability upwind schématu), nevymění se celý obsah látky v elementu. Vlivem zavedených středních hodnot 4.2.1 se část látky, která v elementu zůstala, průměruje s látkou, která do elementu přitekla. Ze vztahu 4.3.10 je patrné jakým způsobem vliv numerické disperze eliminovat. Nastavení časového kroku tak, aby $Cr = 1$ (na všech elementech), je možné jen na rovnoměrně diskretizované 1D oblasti. Na složitějších geometriích numerickou disperzi omezíme jen zjemněním prostorové diskretizace. Jedná se o lokální jev a na složitějších oblastech není tedy její vyčíslení jednoduché. Vzorce si ukazujeme zejména z důvodu, abychom hodnotu numerické disperze mohli na dané oblasti odhadnout (shora omezit).

4.4 Řešení nerovnovážné výměny

Operátor nerovnovážné výměny je popsán soustavou 2 obyčejných lineárních diferenciálních rovnic,

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_m}{\partial t} &= \frac{\alpha}{n_m}(c_i - c_m), \\ \frac{\partial c_i}{\partial t} &= -\frac{\alpha}{n_i}(c_i - c_m). \end{aligned} \quad (4.4.1)$$

Vynásobením obou rovnic příslušnými porozitami a jejich následným součtem, získáme rovnici ve tvaru

$$n_m \frac{\partial c_m}{\partial t} + n_i \frac{\partial c_i}{\partial t} = 0, \quad (4.4.2)$$

který reprezentuje zákon zachování hmoty. Platí tedy

$$c_m n_m + c_i n_i = \text{const.} = \bar{c}(n_m + n_i); \quad \bar{c} = \frac{c_m n_m + c_i n_i}{n_m + n_i}, \quad (4.4.3)$$

kde symbolem $\bar{c}$ označíme rovnovážnou koncentraci v pórech (při ustavení rovnováhy). Odvodíme si postup řešení pro koncentrace v systému mobilních pórů,

ze vztahu 4.4.1 vyjádříme c_i a tento výraz dosadíme do první rovnice soustavy 4.4.1 a tím získáme rovnici

$$\begin{aligned} \frac{dc_m}{dt} &= \frac{\alpha}{n_m} \frac{\bar{c}(n_m + n_i) - c_m n_m - c_m n_i}{n_i} \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{dc_m}{dt} &= \frac{-\alpha(n_m + n_i)}{n_m n_i} (c_m - \bar{c}) \end{aligned} \quad (4.4.4)$$

Separací proměnných a uvažováním počáteční podmínky $c_m(0)$ můžeme rovnici 4.4.4 vyřešit

$$\begin{aligned} \int_{c_m(0)}^{c_m(t)} \frac{dc_m}{c_m - \bar{c}} &= \int_0^t \frac{-\alpha(n_m + n_i)}{n_m n_i} dt \Rightarrow \\ \Rightarrow c_m(t) &= (c_m(0) - \bar{c}) e^{-\alpha \frac{n_m + n_i}{n_m n_i} t} + \bar{c}. \end{aligned} \quad (4.4.5)$$

Pro úplnost si uvedeme i řešení pro imobilní póry. Postup je analogický

$$c_i(t) = (c_i(0) - \bar{c}) e^{-\alpha \frac{n_m + n_i}{n_m n_i} t} + \bar{c}. \quad (4.4.6)$$

Výměna látky mezi póry dle uvedených řešení je závislá nejen na koeficientu nerovnovážné výměny α , ale i na mobilní a imobilní porozitě. Vliv jednotlivých faktorů bude porovnán v další kapitole na příkladech. Převedením rovnic řešení do diskrétní formy a substitucí počátečních podmínek za příslušné koncentrace z předchozího kroku získáme rovnice ve tvaru

$$\begin{aligned} C_m^{(n+1)} &= (C_m^{(n)} - \bar{C}^{(n)}) e^{-\alpha \frac{n_m + n_i}{n_m n_i} t} + \bar{C}^{(n)}, \\ C_i^{(n+1)} &= (C_i^{(n)} - \bar{C}^{(n)}) e^{-\alpha \frac{n_m + n_i}{n_m n_i} t} + \bar{C}^{(n)}, \end{aligned} \quad (4.4.7)$$

kde $\bar{C}^{(n)}$ je výraz $\bar{c}$ ze vztahu 4.4.3 vyčíslený pomocí středních hodnot koncentrací ze vztahu 4.2.1.

4.5 Řešení rovnovážné sorpce

Sorpční rovnováha lze pro lineární izotermu určit analyticky. Zbývající uvažované nelineární izotermy nemají analytické řešení, a proto musíme dílčí problém sorpce řešit numericky. Vzhledem k charakteru problému je vhodné použít Newton-Ralphsonovu metodu, kdy řešení rovnice hledáme jako posloupnost

bodů ve tvaru

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}. \quad (4.5.1)$$

Počáteční přiblížení budeme uvažovat $x_0 = 0$. Ze vzorce je patrná podmínka na konečnost derivace, která je porušena u Freundlichovy izotermy pro všechny fyzikálně reálné koeficienty α . Tento problém budeme řešit dále. Vyjdeme ze vztahu 3.2.10 a vyjádříme si $\mathbf{c}_p$ pomocí středních hodnot koncentrací, pak můžeme místo objemů pracovat s porozitami

$$\mathbf{C}_p = \begin{pmatrix} C_{pm} \\ C_{pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_m + S_m(1-n)/n_m \\ C_i + S_i(1-n)/n_i \end{pmatrix}. \quad (4.5.2)$$

Soustava rovnic sorpční rovnováhy bude mít tvar

$$\begin{pmatrix} C_m + f_m(C_m) - C_{pm} \\ C_i + f_i(C_i) - C_{pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.5.3)$$

Řešení sorpční rovnováhy si ukážeme na první rovnici ze soustavy 4.5.3. Pro uvažované izotermy budou rovnovážné stavy vypočteny následovně:

4.5.1 Lineární izoterma

Řešení sorpční rovnováhy pro lineární izotermu vede na lineární rovnici, jejíž řešení je ve tvaru

$$C_m^{(n+1)} = \frac{C_{pm}^{(n)}}{1 + k_{Dm}} \quad (4.5.4)$$

4.5.2 Freundlichova izoterma

Aby výraz 4.5.1 pro Freundlichovu izotermu nebyl singulární, je vhodné linearizovat počáteční interval izotermy. Linearizujeme izotermu na intervalu $\langle 0, C_b \rangle$, přičemž C_b určíme na základě dosažení zvolené hodnoty první derivace, kterou označíme f'_{max} .

$$S' = (k_F C_b^{\alpha_F})' = \alpha_F k_F C_b^{\alpha_F-1} = f'_{max} \quad \rightarrow \quad C_b = \left(\frac{f'_{max}}{\alpha_F k_F} \right)^{\frac{1}{\alpha_F-1}} \quad (4.5.5)$$

Směrnici linearizované části izotermy označíme f'_F , bude mít tvar

$$f'_F = \frac{k_F C_b^{\alpha_F}}{C_b} = k_F C_b^{\alpha_F-1} = \frac{f'_{max}}{\alpha_F} \quad (4.5.6)$$

Na základě předchozí úvahy definujeme aproximaci Freundlichovy izotermy ve tvaru

$$S(C) = \begin{cases} f'_F C & x \in \langle 0, C_b \rangle \\ k_F C^{\alpha_F} & x \in (C_b, C_{max}) \end{cases} \quad (4.5.7)$$

Symbol C_{max} označuje maximální možnou koncentraci látky. Dosazením aproximace Freundlichovy izotermy 4.5.7 do vztahu 4.5.3, jeho diferencováním a využitím vztahu 4.5.1 získáme posloupnost bodů ve tvaru

$$C_{m(i+1)}^{(n)} = C_{m(i)}^{(n)} + \frac{C_{pm}^{(n)} - C_{m(i)}^{(n)} - (k_{Fm} C_{m(i)}^{\alpha_F(n)} : f'_F C_{m(i)}^{(n)})}{1 + (k_{Fm} C_{m(i)}^{\alpha_F-1(n)} : f'_F)}. \quad (4.5.8)$$

4.5.3 Langmuirova izoterma

Dosazením rovnice Langmuirovy izotermy 2.3.7 do vztahu 4.5.3 a dále ekvivalentním postupem jako v přechodím případě získáme posloupnost bodů ve tvaru

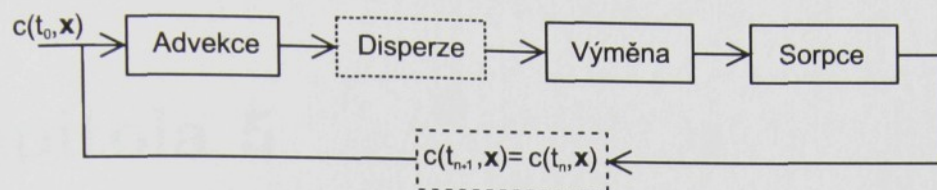
$$C_{m(i+1)}^{(n)} = C_{m(i)}^{(n)} + \frac{C_{pm}^{(n)} - C_{m(i)}^{(n)} - \frac{K_L s^{max} C_{m(i)}^{(n)}}{1 + K_L C_{m(i)}^{(n)}}}{\left(1 + \frac{K_L s^{max}}{1 + K_L C_{m(i)}^{(n)}}\right)^2}. \quad (4.5.9)$$

Pro řešení rovnovážných stavů u Freundlichovy izotermy 4.5.8 a Langmuirovy izotermy 4.5.9 můžeme zapsat symbolický výraz ve tvaru

$$C_m^{(n+1)} = \lim_{i \rightarrow \infty} C_{m(i)}^{(n)}, \quad (4.5.10)$$

iterační proces však pro zvolené funkce konverguje v řádu jednotek cyklů.

4.6 Algoritmus



Obrázek 4.1: Schéma algoritmu

Posloupnost kroků s jednotlivými operátory je znázorněna na obrázku výše. Disperze v modelu implementována není, tento jev je částečně zastoupen numerickou disperzí, která je vedlejším produktem upwind schématu. V jistém smyslu disperzi zastupuje i výměna mezi mobilními a imobilními póry, která je závislá na koeficientu molekulární difuzivity ve vodě. Manuál programu ve formě popisu vstupních souborů je součástí přílohy na CD.

Kapitola 5

Testovací úlohy

V této kapitole si nejprve na jednoduché homogenizované úloze ukážeme vliv jednotlivých fyzikálních procesů a jejich parametrů na migraci radionuklidů. Z úlohy bude patrné, proč je vhodné pro popis horninového prostředí používat multidimenzionální modely, kterými se budeme zabývat dále.

Odhad horní meze numerické disperze

Pro odhad horní meze numerické disperze vyjdeme ze vztahu pro výpočet numerické disperze pro 1D případ 4.3.10 a ze vztahu pro výpočet Courantova čísla pro 3D případ 4.3.9. Pro výpočet lokálního kroku prostorové diskretizace na elementu e_k využijeme vztahu

$$\Delta x^{e_k} = \left(\frac{d^{e_k} V^{e_k}}{d_c^{e_k}} \right)^{\frac{1}{d^{e_k}}}, \quad (5.0.1)$$

kde d^{e_k} je dimenze elementu a $d_c^{e_k}$ velikost doplňkového rozměru elementu (u 1D a 2D elementů), pro 3D případ $d_c = 1$. Rychlost toku v^{e_k} na elementu e_k určíme dle vztahu

$$v^{e_k} = \frac{\sum_{j \in N_k} U_{kj}^+}{2 \sum_{i \in e_k} \int_{f_i} dS}, \quad (5.0.2)$$

kde výraz $\sum_{i \in e_k} \int_{f_i} dS$ je číselně roven součtu ploch stěn elementu e_k . Pro horní odhad velikosti numerické disperze $\bar{D}_{num}^M$ v materiálu M , můžeme dosazením vztahů 4.3.9, 5.0.1, 5.0.2 do vztahu 4.3.10 psát výsledný vzorec ve tvaru

$$\bar{D}_{num}^M = \max_{\forall e_k \in M} \left(\frac{\sum_{j \in N_k} U_{kj}^+}{4 \sum_{i \in e_k} \int_{f_i} dS} \left(\frac{d^{e_k} V^{e_k}}{d_c^{e_k}} \right)^{\frac{1}{d^{e_k}}} \left(1 - \frac{\Delta t \sum_{j \in N_k} U_{kj}^+}{V^{e_k}} \right) \right). \quad (5.0.3)$$

5.1 Transport v homogenním prostředí

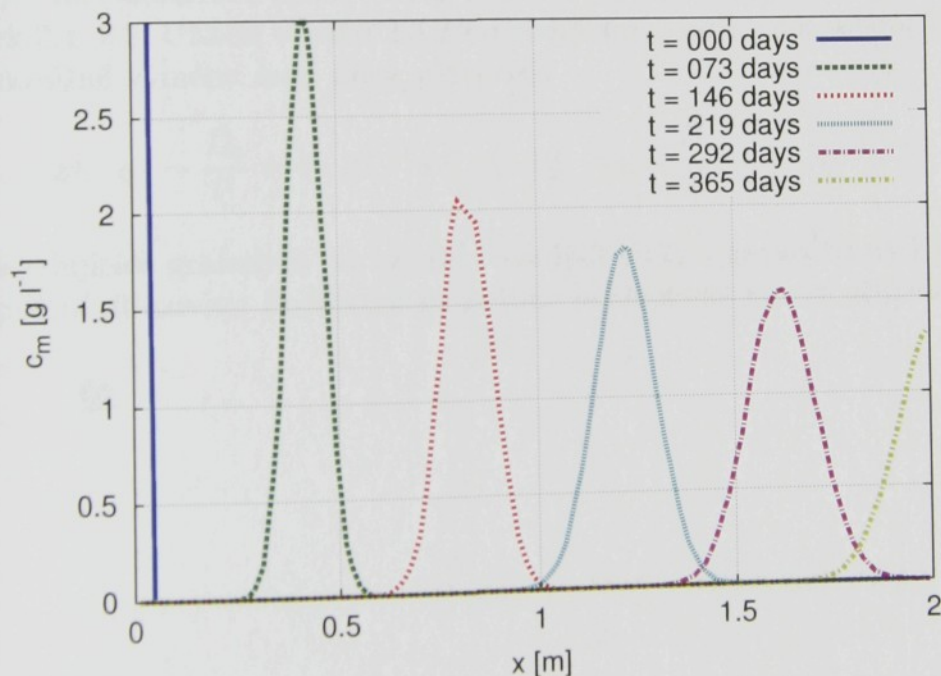
5.1.1 Transport bez interakcí s horninou

Mějme homogenizovaný hranol granitu s hydraulickou propustností $K = 3,2 \cdot 10^{-7} \text{ m s}^{-1}$, délkou $l = 2 \text{ m}$, gradientem piezometrické výšky $\nabla z = \frac{P_1 - P_2}{l} = \frac{0,002}{2} = 0,001$ a porozitou (mobilní) $n = 0,005$. Jedná se o modelový případ, ale zadané hodnoty odpovídají skutečným hodnotám, viz. [6] a [10]. Situační schéma včetně triangulární sítě je na následujícím obrázku.



Obrázek 5.1: Homogenizovaný hranol horniny

Červenou barvou v síti je vyznačena počáteční podmínka koncentrace látky $c_0 = 10 \text{ g l}^{-1}$. Pronikání látky do horniny v čase je znázorněno na grafu 5.2.



Graf 5.2: Časový průběh koncentrace bez interakcí s horninou

Na vodorovné ose je vynášena poloha těžiště elementu. Posun pole koncentrace

budeme sledovat podle polohy maxima příslušné charakteristiky. Neuvažujeme-li interakce s horninou, pole koncentrace se posune při zadaných okrajových podmínkách přibližně do vzdálenosti $x = 2\text{ m}$ za čas $t = 1\text{ rok}$ a maximální koncentrace poklesne přibližně na 13% původní hodnoty. Horní mez koeficientu numerické disperze byla určena dle vztahu 5.0.3, $\bar{D}_{num} \doteq 2,23 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, hodnota byla ověřena na analyticky řešené 1D úloze v programu JBONE [11].

5.1.2 Transport se zahrnutím interakcí s horninou

Uvažujme shodné zadání jako v předchozí úloze, které rozšíříme o interakce látky s horninou. Sady vstupních dat jsou voleny s ohledem, aby jednotlivé procesy způsobující retardaci byly dobře patrné. Transport látky rozšíříme o:

1) Imobilní porozitu

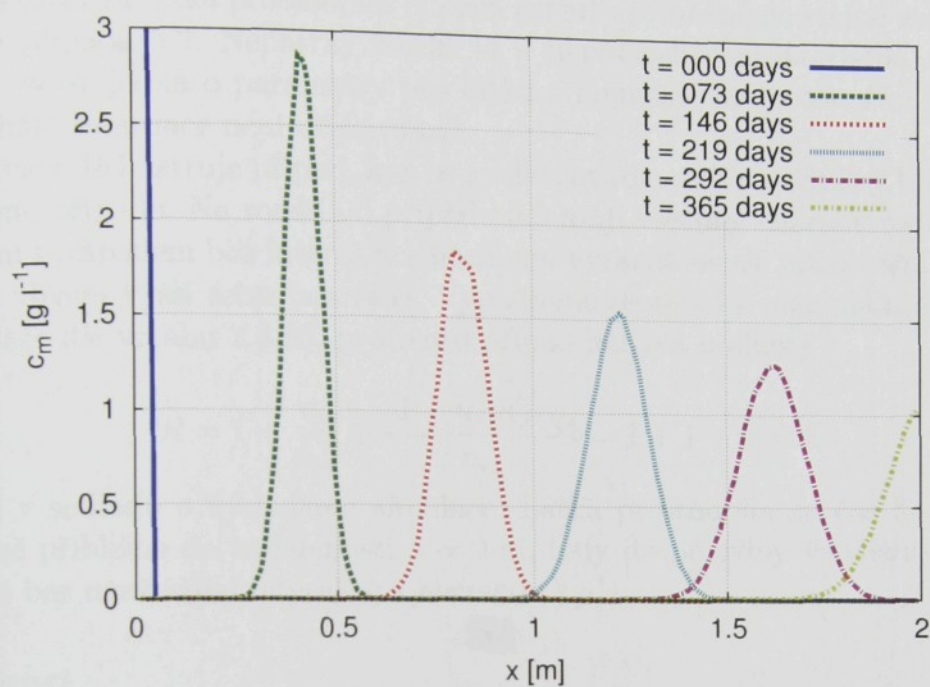
Uvažujme imobilní porozitu $n_i = 0,005$, charakteristickou délku $l_c = 0,01\text{ m}$ a o koeficientu molekulární difuzivity předpokládejme $D_m \approx D_e$. D_m zvolme

$$\text{a) } D_{m1} = 0,04 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad \text{b) } D_{m2} = 9 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}.$$

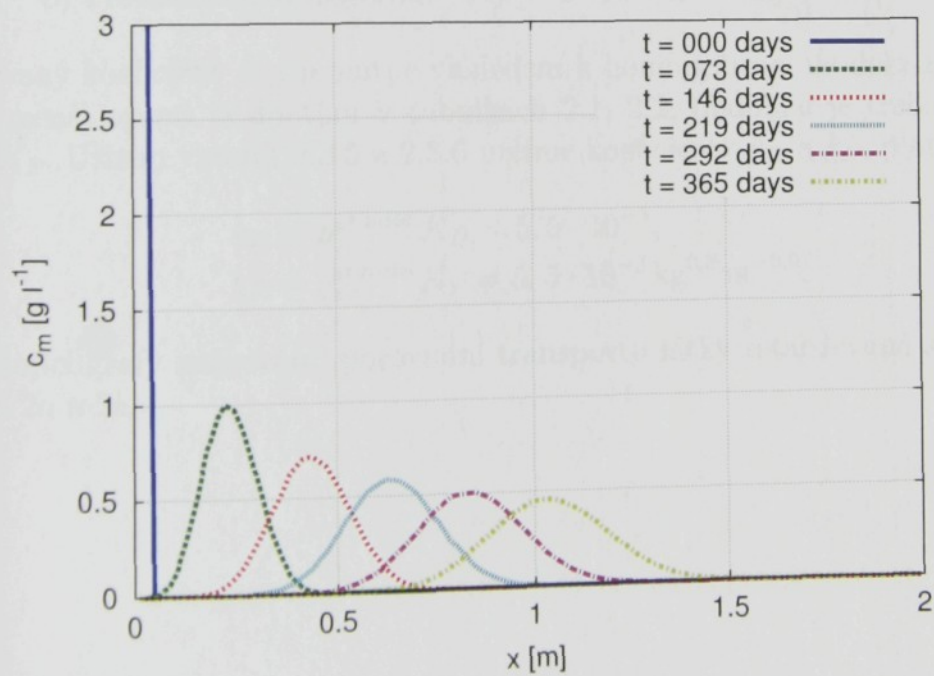
Hodnoty molekulárních difuzivit D_m korelují největší a nejmenší hodnotu D_e z tabulek 2.1, 2.2. Užitím vztahu 2.3.3 určíme pomocí zadaných veličin koeficient nerovnovážné výměny mezi póry, platí tedy

$$\text{a) } \alpha_1 \sim \frac{D_e}{l_c^2} = 4 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1} \quad \text{b) } \alpha_2 \sim \frac{D_e}{l_c^2} = 9 \cdot 10^{-9} \text{ s}^{-1}.$$

Na následujících grafech je porovnání retardace látky v závislosti na koeficientu molekulární difuzivity. Počáteční podmínka je identická jako v případě 5.2.



Graf 5.3: Časový průběh koncentrace pro zadání 1a



Graf 5.4: Časový průběh koncentrace pro zadání 1b

V situaci 1a látka prostoupila blokem granitu přibližně do stejné vzdálenosti jako v případě 5.2. Nepatrný rozdíl je v maximech charakteristik. Je nutné uvážit, že se jedná o parametry pro látku s nejmenší hodnotou D_e , proto ani významná retardace není očekávána.

Situace 1b ilustruje případ, kdy se koeficient rovnovážné výměny blíží rovnovážnému případu. Na rozdíl od případu 5.3 mají všechny charakteristiky v porovnání s případem bez interakce s horninou výrazně menší maximální hodnotu a jsou vlivem vyšší retardace širší. Vypočteme teoretický maximální koeficient retardace dle vztahu 2.3.23, pro tento případ nabývá hodnoty

$$R = 1 + \frac{n_i}{n_m} + \frac{(1-n) K_D \varrho_s}{n_m} = 1 + 1 + 0 = 2, \quad (5.1.1)$$

což je v souladu s výsledkem simulace. Látka prostoupila za čas $t = 1$ rok v hornině přibližně do vzdálenosti $x = 1$ m, tedy do poloviny vzdálenosti oproti situaci bez uvažované interakce s horninou.

2) Sorpci

Uvažujme hustotu horniny $\varrho_s^{granite} = 2750 \text{ kg m}^{-3}$

a) lineární izotermu $K_D = 2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

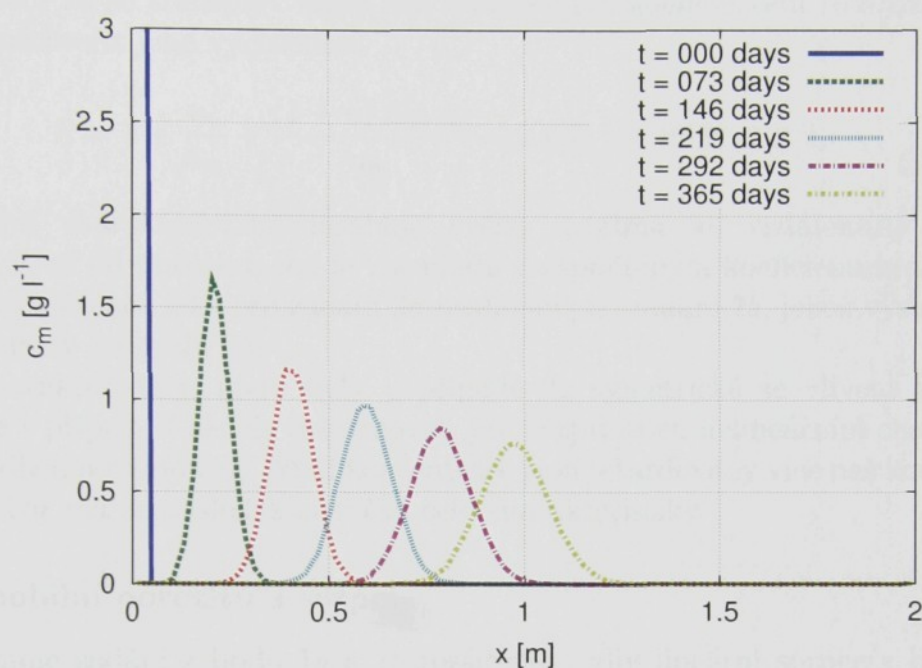
b) Freundlichovu izotermu $K_F = 2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^{3\alpha_F} \text{ kg}^{-\alpha_F}$, $\alpha_F = 0,7$

Uvažovaný koeficient K_D je nutné vzhledem k homogenizaci modelu zvolit výrazně menší oproti hodnotám v tabulkách 2.1, 2.2, obdobně je třeba zvolit i malý K_F . Užitím vztahů 2.3.5 a 2.3.6 určíme koeficienty k_D a k_F , platí tedy

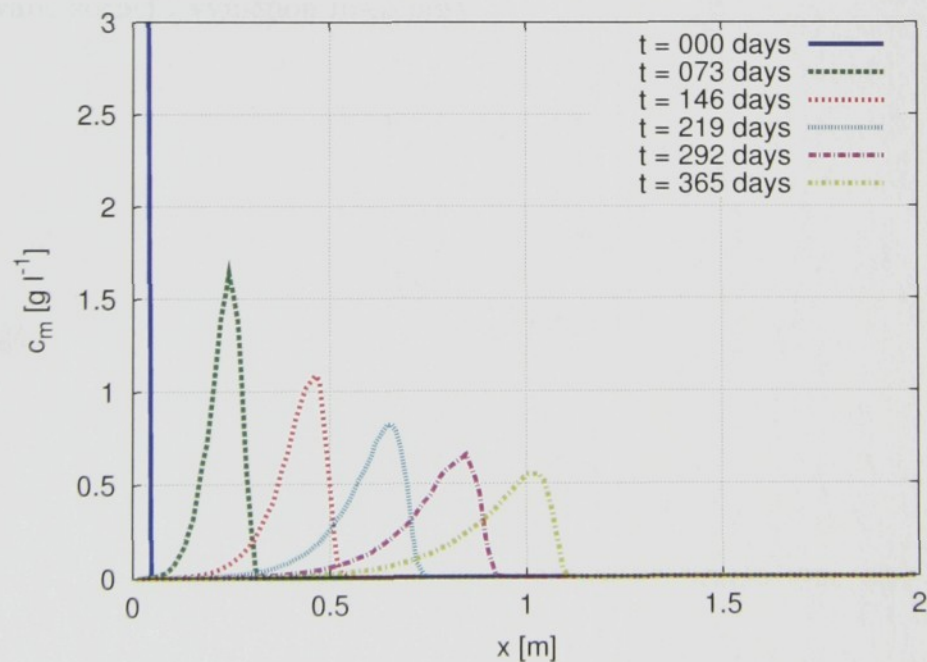
$$k_D = \varrho_s^{granite} K_D = 5,5 \cdot 10^{-3},$$

$$k_F = \varrho_s^{granite} K_F = 5,5 \cdot 10^{-3} \text{ kg}^{0,3} \text{ m}^{-0,9}.$$

Následující grafy znázorňují porovnání transportu látky retardované sorpcí dle zadání 2a a 2b.



Graf 5.5: Časový průběh koncentrace pro zadání 2a



Graf 5.6: Časový průběh koncentrace pro zadání 2b

V situaci 2a se transport látky řídí teoretickým koeficientem retardace, což si můžeme overit jeho vyčíslením

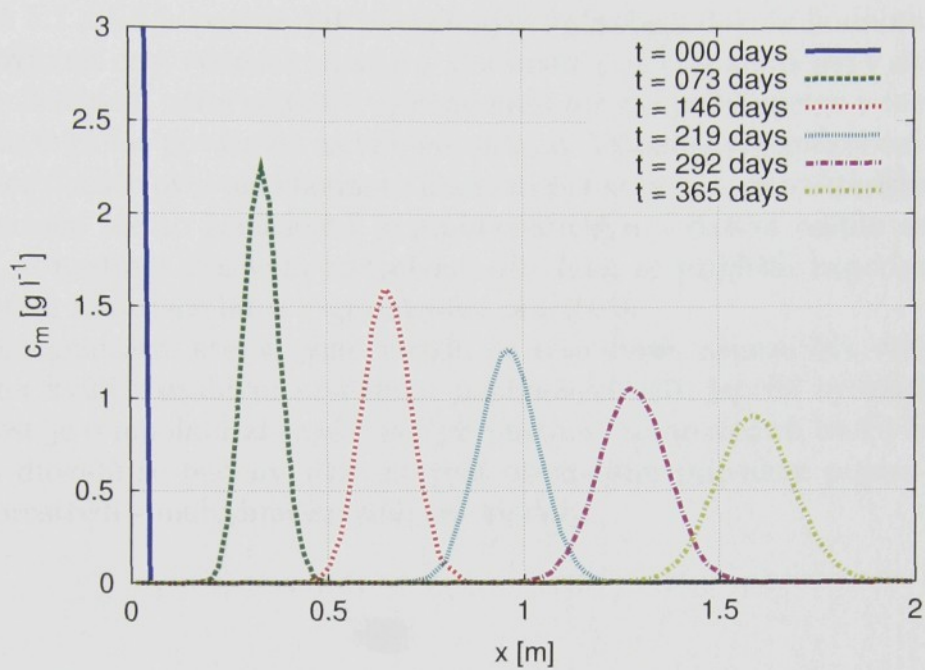
$$R = 1 + \frac{n_i}{n_m} + \frac{(1 - n) K_D \varrho_s}{n_m} = 1 + 0 + 1,0945 \approx 2,1. \quad (5.1.2)$$

Poslední charakteristika dosahuje svého maxima ve vzdálenosti přibližně $x = 0,95$ m od počátku, což je v souladu s vypočteným koeficientem retardace. Podobná situace jako pro zadání 2a nastává i pro zadání 2b, jehož výsledky jsou znázorněny na grafu 5.6.

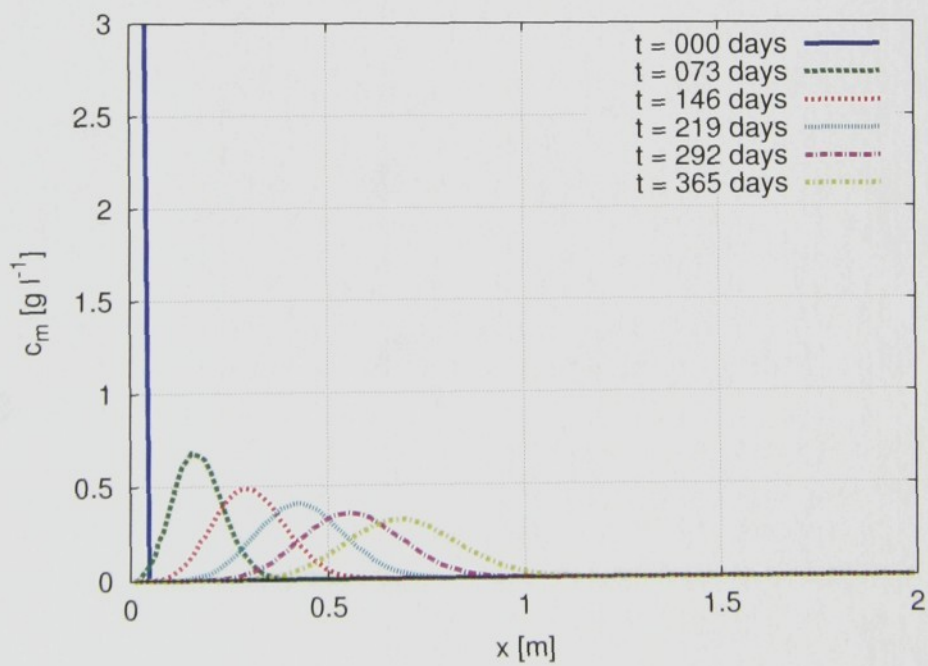
Charakteristiky, které byly v případě 2a symetrické se vlivem nelineární sorpce v případě 2b začaly deformovat, jev je způsoben nelineárním charakterem Freundlichovy izotermy. Nižší koncentrace jsou retardovány více než koncentrace vyšší, což má za následek strmější čelo charakteristiky.

3) Imobilní porozitu a sorpci

Uvažujme zadání z bodu 1a a 1b rozšířené o vliv lineární sorpce z bodu 2a s parametrem $\psi = 0,25$. Pro parametr $\psi \rightarrow 1$ by se výsledky úlohy při vyšších k_D blížily úloze rovnovážné sorpce z bodu 2, neboť sorpce je v našem případě pro většinu látek významějším retardačním faktorem než výměna mezi póry. Na grafech 5.7 a 5.8 je znázorněno pronikání látky do horninového masivu retardované sorpcí i výměnou mezi póry.



Graf 5.7: Časový průběh koncentrace pro zadání 3a



Graf 5.8: Časový průběh koncentrace pro zadání 3b

Z grafů 5.7 a 5.8 je patrné, jak významným způsobem dokáže hodnota parametru ψ ovlivnit celý výsledek simulace. Parametr ψ je významný jen v situaci, kdy se s koeficientem nerovnovážné výměny mezi póry α pohybujeme v mezích, kdy výměnu můžeme považovat za nerovnovážnou. Významným způsobem výsledek simulace dokáže ovlivnit i hodnota imobilní porozity n_i a charakteristická délka l . Stanovení těchto koeficientů je problematické a v dalším oddílu se budeme snažit je nastavit takovým způsobem, abychom se přiblížili experimentálním hodnotám retardace látek v granitovém prostředí.

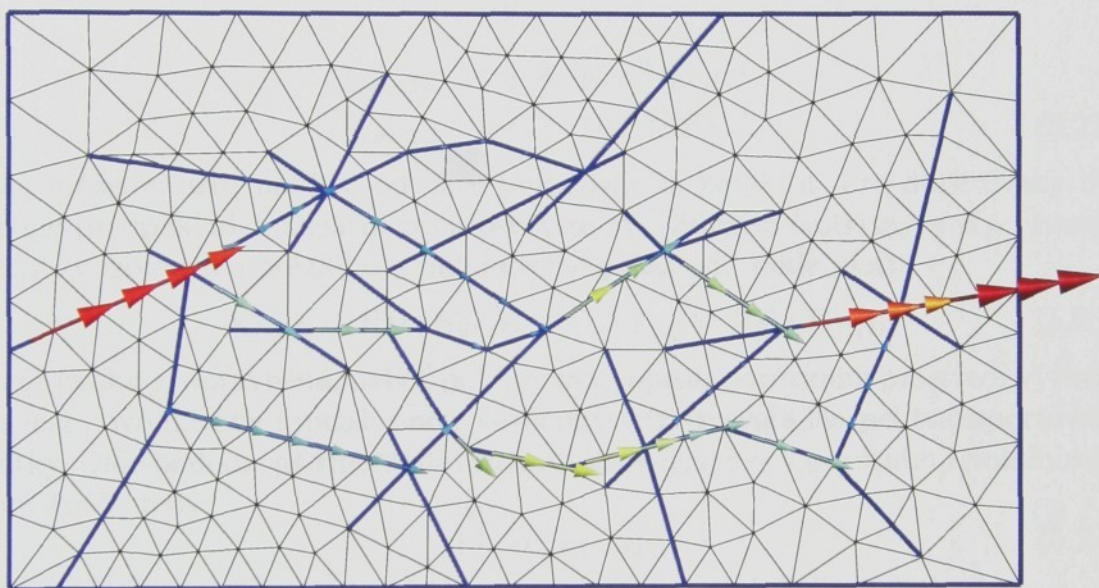
Homogenizace, kterou jsme zavedli na této úloze, nemusí být vždy možná, zejména kvůli rozsáhlým systémům puklinových sítí, jejichž hydraulická propustnost je o mnoho řádů vyšší než propustnost kompaktních bloků horniny. Z těchto důvodů se budeme dále zabývat obecnějším případem popisu horninového prostředí - multidimenzionálními modely.

5.2 Transport v heterogenním prostředí

V tomto oddílu si ukážeme výpočty transportu na multidimenzionální rovině a prostorové úloze. Na rozdíl od homogenizovaných úloh zde budeme již užívat experimentální hodnoty distribučních koeficientů K_D .

5.2.1 Rovinná multidimenzionální úloha

V následující úloze si ukážeme transport na rovině puklinové úloze, jejíž geometrie, triangulární síť a pole filtračních rychlostí je znázorněno na následujícím obrázku



Obrázek 5.9: Puklinová úloha

Rozměry oblasti jsou $12,75 \times 8,25$ m, na svislých stěnách oblasti je zadána Dirichletova okrajová podmínka pro proudění, gradient piezometrické výšky $\nabla z = \frac{P_1 - P_2}{l} = \frac{0,01275}{12,75} = 0,001$. Na stěně, kterou voda vtéká do oblasti, je zadána Dirichletova okrajová podmínka transportu $c_D = 10 \text{ g l}^{-1}$. Hydraulická propustnost 2D prvků reprezentujících kompaktní horninový masiv je $K_{2D} = 3,2 \cdot 10^{-10} \text{ m s}^{-1}$, rozevření 2D prvků je $d_{c,2D} = 1$ m (hloubka geometrie), mobilní porozita $n_{m,2D} = 0,005$, imobilní porozita $n_{i,2D} = 0,005$ a $\psi_{2D} = 0,3$. Hydraulickou propustnost 1D prvků reprezentujících pukliny je $K_{1D} = 3,2 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$, průřez puklinových prvků je $d_{c,1D} = 3 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$, mobilní porozita $n_{m,1D} = 0,7$, imobilní porozita $n_{i,1D} = 0,2$ a $\psi_{1D} = 0,5$.

Oprávněnost užití pouze advekčního modelu ověříme výpočtem Pécletova čísla dle vztahu 2.3.17, za hodnotu D_e dosadíme nejmenší a největší hodnotu z tabulek 2.1 a 2.2, tedy $D_e^{max} = 9 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a $D_e^{min} = 4 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$,

$$Pe_{1,2D} = \frac{|v|l_c}{D_m} = \frac{|-\mathbf{K}\nabla p|l_c}{n_m D_m} = \langle 0, 71; 160 \rangle. \quad (5.2.1)$$

Analogickým postupem bychom mohli ověřit hodnotu Pécletova čísla v puklinách (liniových prvcích), ve kterých je podmínka zanedbání vlivu molekulární difuze splněna, neboť $Pe_{1,1D} > 7 \cdot 10^4$. Pro většinu látek je užití pouze modelu advekce v kompaktním bloku masivu (2D prvcích) na hranici matematické korektnosti. Uvažíme-li však hodnoty numerické disperze (v podélném směru), které dosahují hodnot srovnatelných s molekulární difuzí

$$\begin{aligned} \bar{D}_{num,2D} &\doteq 1,8 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \\ \bar{D}_{num,1D} &\doteq 5,7 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

tak můžeme užití modelu advekce považovat za korektní. Pro další úvahy budeme předpokládat lineární závislost mezi K_D lineární izotermy a K_F Freundlichovy izotermy porézního a puklinového prostředí, bude platit

$$K_{D,2D} = 100 \cdot K_{D,1D}, \quad K_{F,2D} = 100 \cdot K_{F,1D}, \quad (5.2.3)$$

tato úvaha je oprávněná, neboť pukliny mají oproti poréznímu prostředí výrazně menší povrch, tedy i menší počet sorpčních center pro adsorpci transportované látky. Dále budeme předpokládat rovnost koeficientů α v porézním i puklinovém prostředí, tedy

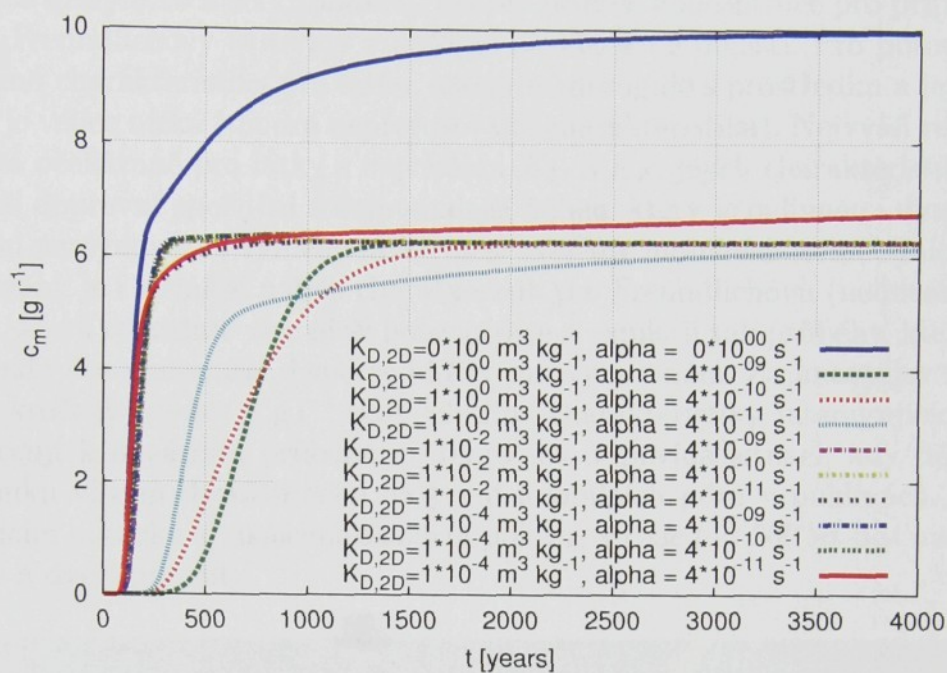
$$\alpha = \alpha_{1D} = \alpha_{2D}. \quad (5.2.4)$$

Výpočty provedeme pro kombinace parametrů v následující tabulce

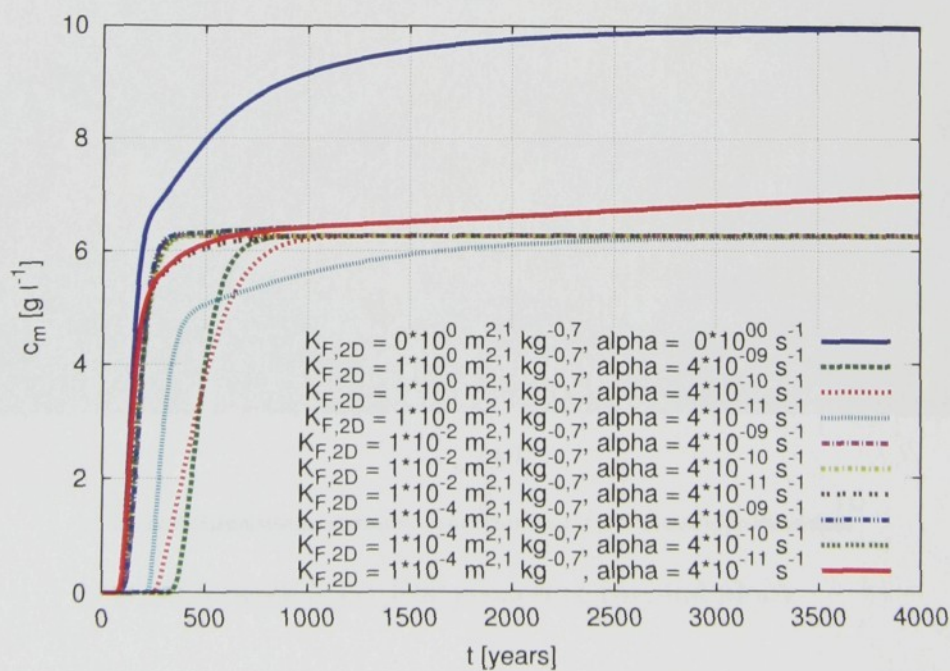
$\alpha [\text{s}^{-1}]$	$4 \cdot 10^{-9}$	$4 \cdot 10^{-10}$	$4 \cdot 10^{-11}$
$K_{D,2D} [\text{m}^3 \text{ kg}^{-1}]$	1	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-4}$
$K_{F,2D} [\text{m}^{3\alpha_F} \text{ kg}^{-\alpha_F}]$	1	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-4}$

Tabulka 5.1: Kombinace vstupních parametrů pro rovinnou úlohu

Koeficienty α v tabulce 5.1 jsou vypočteny pro charakteristickou délku $l_c = 0,01 \text{ m}$, hodnoty D_e byly určovány tak, aby reprezentovaly většinu látek ($D_{e1} = 4 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $D_{e2} = 4 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $D_{e3} = 4 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$). Podobným způsobem byly určovány i distribuční koeficienty $K_{D,2D}$. Hodnoty koeficientů Freundlichovy izotermy byly určeny dle hodnot K_D lineární izotermy (experimentální data nebyla k dispozici), dále budeme uvažovat také $\alpha_{F,2D} = \alpha_{F,1D} = 0,7$.

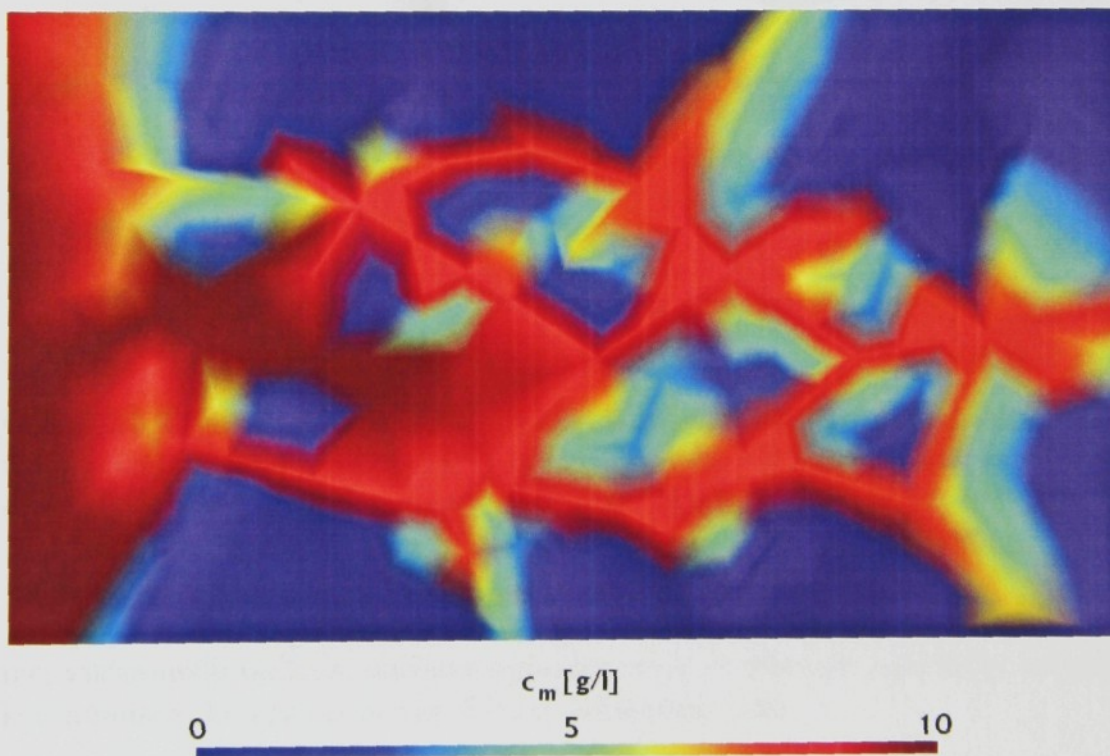


Graf 5.10: Průběh koncentrace pro lineární izotermu



Graf 5.11: Průběh koncentrace pro Freundlichovu izotermu

Uvedené grafy 5.10 a 5.11 zobrazují časový průběh koncentrace pro případ lineární a Freundlichovy izotermy v puklině na výtoku z oblasti. Pro porovnání je vynesena charakteristika pro látku, která neinteraguje s prostředím a jejíž difuzivita je velice nízká (modrá nepřerušovaná charakteristika). Nejvyšší retardace nastává očekávaně pro látky s největšími K_D a K_F , jejich charakteristiky mají největší dopravní zpoždění a nejpomalejší náběh, který je ovlivněn i dynamikou procesu nerovnovážné výměny látky mezi systémy mobilních a imobilních pórů. Očekávaný je i strmější náběh charakteristik pro Freundlichovu (nelineární) izotermy, která retarduje více nižší koncentrace a vznikají tak průběhy, které by se v případě bez numerické disperze blížily rázovým vlnám. Zajímavý jev nastává po překročení hranice 6 g l^{-1} , kdy všechny charakteristiky interagujících látek konvergují k lineárním průběhům. Tento jev odpovídá situaci, kdy děj ztrácí dynamiku vlivem dostatečného nasycení imobilních pórů v puklinách. Na následujícím obrázku si ukážeme skalární pole c_m v čase $t = 500$ let bez uvažování sorpce a dvojí porozity.

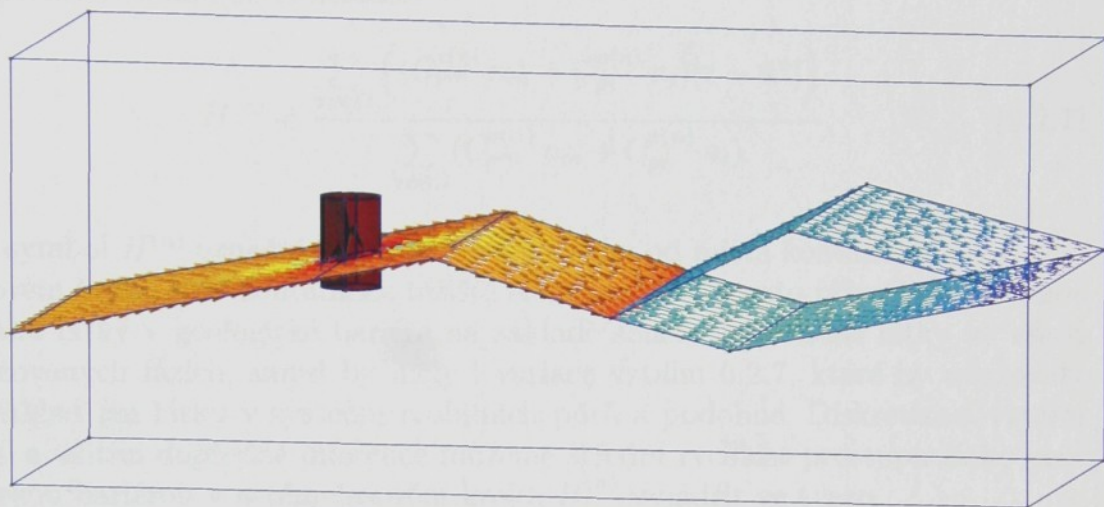


Obrázek 5.12: Postprocesing rovinné úlohy

Z obrázku 5.12 je zřejmé jak významnou roli, vzhledem ke své hydraulické propustnosti, hrají puklinové systémy. Většina látky se nachází právě v nich.

5.2.2 Prostorová úloha

Následující úloha se svým charakterem bude blížit skutečným formacím v horninovém prostředí. Uvažujme puklinovou 3D geometrii znázorněnou na následujícím obrázku.



Obrázek 5.13: Situační schéma prostorové úlohy

Obrázek 5.13 znázorňuje situační schéma úlohy, pole filtračních rychlostí a počáteční podmínku pole koncentrací - červený objekt válcového tvaru, který představuje narušený kontejner s radioaktivním odpadem. Jako parametry horniny jsme užili hodnoty uvažované v předchozím oddílu. Analogicky budeme uvažovat i hodnoty z tabulky 5.1 a vztahy 5.2.3 a 5.2.4.

Na rozsáhlejších oblastech, na kterých nepředpokládáme, že by látka hranicí významněji unikala, můžeme vyhodnocovat vzdálenost pole látky od místa kontaminace, kterou označíme $H(t)$ a definujeme jako

$$H(t) = \frac{\int_{\Omega} \varrho(\mathbf{x}, t) |\mathbf{r} - \mathbf{x}| \, d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} \varrho(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x}}, \quad (5.2.5)$$

kde $\mathbf{r}$ je poloha místa kontaminace a $\varrho(\mathbf{x}, t)$ funkce popisující pole hustoty látky na uvažované oblasti. Diferencováním vztahu 5.2.5 můžeme definovat střední

rychlost prostupu látky geologickou bariérou $H_t(t)$.

$$H_t(t) = \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\int_{\Omega} \varrho(\mathbf{x}, t) |\mathbf{r} - \mathbf{x}| d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} \varrho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}} \right) \quad (5.2.6)$$

Vzhledem k zavedené diskretizaci oblasti je třeba diskretizovat i uvedené vztahy, diskretizací vztahu 5.2.5 získáme

$$H^{(n)} = \frac{\sum_{\forall e \in \Omega} \left((C_{pm}^{e(n)} n_m + C_{pi}^{e(n)} n_i) |\mathbf{r} - \mathbf{x}^e| \right)}{\sum_{\forall e \in \Omega} (C_{pm}^{e(n)} n_m + C_{pi}^{e(n)} n_i)}, \quad (5.2.7)$$

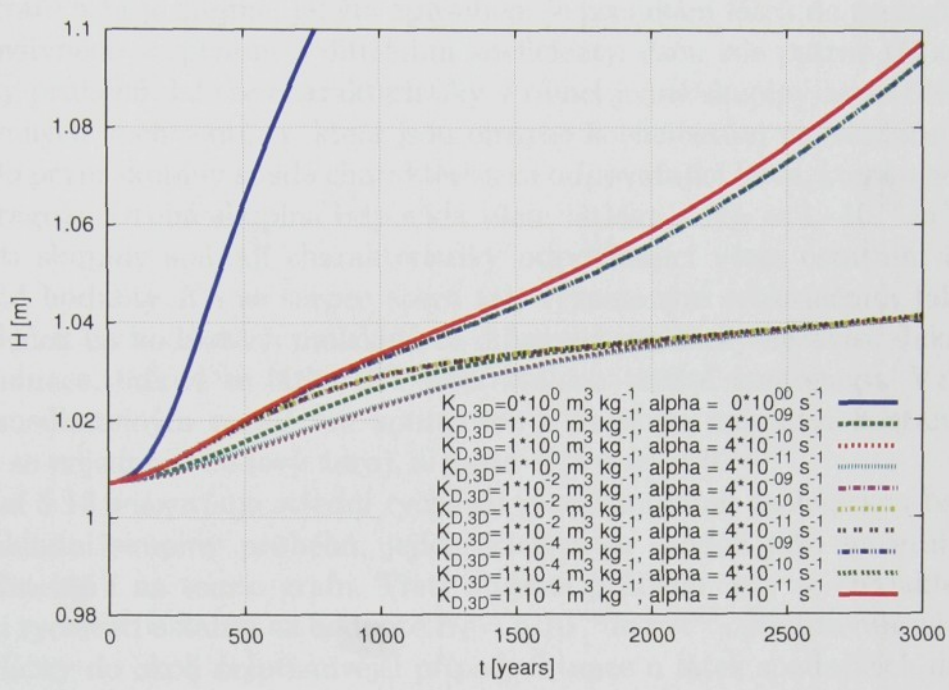
kde symbol $H^{(n)}$ označuje vzdálenost pole látky od místa kontaminace v n -tém časovém kroku a $\mathbf{x}^e$ souřadnice těžiště elementu e . V tomto případě hodnotíme polohu látky v geologické bariéře na základě součtu hmotností látky ve všech uvažovaných fázích, smysl by měly i variace vztahu 5.2.7, které by uvažovaly například jen látku v systému mobilních pórů a podobné. Diskretizací vztahu 5.2.6 a užitím dopředné difference můžeme střední rychlost prostupu látky geologickou bariérou v n -tém časovém kroku $H_t^{(n)}$ vyjádřit ve tvaru

$$H_t^{(n)} = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\sum_{\forall e \in \Omega} \left((C_{pm}^{e(n+1)} n_m + C_{pi}^{e(n+1)} n_i) |\mathbf{r} - \mathbf{x}^e| \right)}{\sum_{\forall e \in \Omega} (C_{pm}^{e(n+1)} n_m + C_{pi}^{e(n+1)} n_i)} - \frac{\sum_{\forall e \in \Omega} \left((C_{pm}^{e(n)} n_m + C_{pi}^{e(n)} n_i) |\mathbf{r} - \mathbf{x}^e| \right)}{\sum_{\forall e \in \Omega} (C_{pm}^{e(n)} n_m + C_{pi}^{e(n)} n_i)} \right). \quad (5.2.8)$$

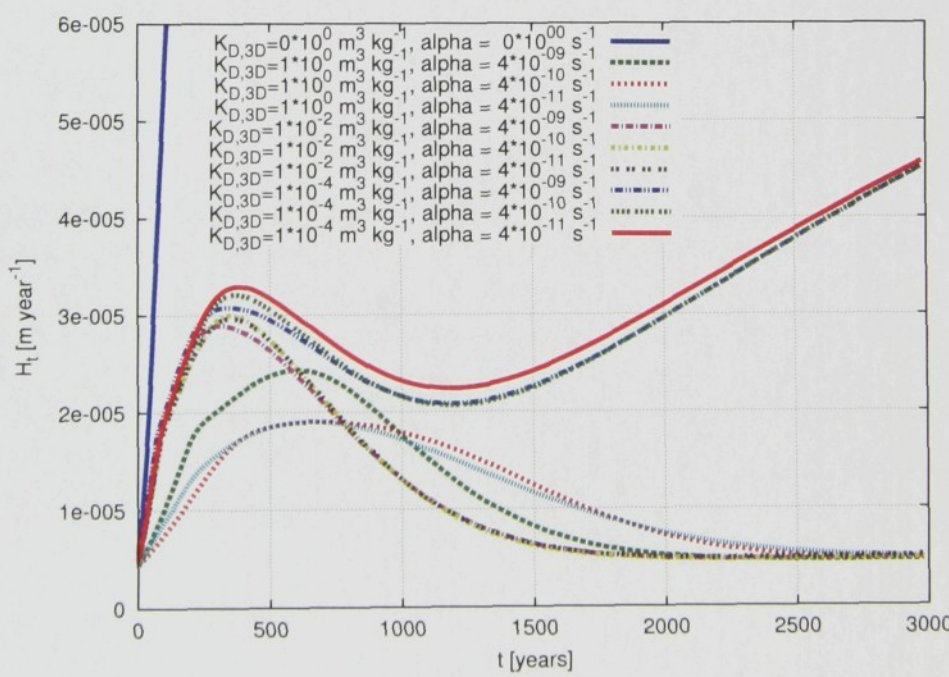
Přístup k problematice na základě takto definovaných globálních veličin H resp. H_t zavádí objektivní hodnocení daného scénáře v každém časovém kroku právě jednou hodnotou H resp. H_t pro každou transportovanou látku.

Vyhodnocení úlohy

Na základě veličin definovaných výše vyhodnotíme tuto úlohu. Následující grafy ilustrují časový vývoj vzdálenosti skalárních polí od místa kontaminace a jejich průběh střední rychlosti při prostupu geologickou bariérou pro uvažované spektrum parametrů látek.



Graf 5.14: Časový vývoj vzdálenosti pole látek od místa kontaminace



Graf 5.15: Průběh střední rychlosti prostupu látek geologickou bariérou

Z grafu 5.14 je zřejmé, jakým způsobem je pronikání látek do geologické bariéry ovlivněno sorpčními a difuzními koeficienty. Jsou zde patrné tři základní skupiny průběhů, kde se charakteristiky v rámci jedné skupiny nepatrně liší dle uvažovaných koeficientů α , které jsou uměrné koeficientům molekulární difuzivity. Do první skupiny spadá charakteristika odpovídající látce, která s horninou neinteraguje. Druhá skupina odpovídá všem látkám s $K_D = 1 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ a do třetí skupiny spadají charakteristiky odpovídající všem ostatním látkám. Od jisté hodnoty K_D se sorpce stává tak významným retardačním faktorem, že výsledek na hodnotách molekulární difuze již prakticky nezávisí. Jako místo kontaminace, odkud se látka šíří, bylo zvoleno těžiště kontejneru. Vzhledem k nezanedbatelným rozměrům kontejneru a velkému množství kontaminantu uvnitř se nejedná o bodový zdroj, a proto $H(t=0) \neq 0$.

Graf 5.15 znázorňuje střední rychlosti pronikání látek geologickou bariérou. Tři základní skupiny průběhů, jejichž členění je shodné jako na grafu 5.14, jsou zřetelné i na tomto grafu. Třetí skupina průběhů, kdy se charakteristiky střední rychlosti ustalují na hodnotě $H_t \doteq 5 \cdot 10^{-6} \text{ m rok}^{-1}$, představuje z hlediska šíření látky do okolí nejpříznivější případ. Situace u látek spadajících do první a druhé skupiny průběhů je kritičtější, neboť jejich střední rychlost pronikání geologickou bariérou je oproti třetí skupině charakteristik vyšší a ve sledovaném časovém úseku dále narůstá.

Závěr

Mezi základní cíle práce patřilo seznámení s implementací modelu proudění a transportu v softwaru Flow123d. Program nebylo možné přímo použít k výpočtům zadané úlohy, neboť obsahoval některá restriktivní omezení a nedořešené otázky. Jako vedlejší produkt této práce byly sloučeny dvě vývojové verze kódu, které vznikly z původní implementace Flow123d.

Mezi hlavní problémy, které se podařilo vyřešit, patří kalibrace koeficientů v přestupové podmínce Newtonova typu, která realizuje komunikaci mezi prvky různých dimenzí. Vyřešena byla interpolace při přepočtu hodnot do uzlů a modul transportu byl upraven pro porézní prostředí. Veškeré úpravy byly pro korektnost verifikovány a validovány na jednoduchých úlohách. Modul, řešící problematiku transportu, byl rozšířen i o implementaci vlivů běžných typů rovnovážné jednovrstvé sorpce (lineární, Freundlichova, Langmuirova izoterma) s možností snadného doplnění dalších typů izoterm. Součástí implementace vlivu sorpce je i efektivní numerická metoda pro řešení rovnováhy v případě užití nelineárních sorpčních izoterm.

Modifikována byla i struktura vstupních souborů, aby bylo možné zadávat veškeré fyzikální parametry nezávisle pro každou transportovanou látku a ten který horninový materiál. Možnosti postprocesingu byly rozšířeny o vizualizaci neustáleného proudění, výstupy skalárních polí koncentrací a látkových množství ve všech sledovaných fázích a doplněna byla možnost vizualizace transportu látky na celé 3D oblasti. Dále byl program zobecněn pro výpočet na geometriích s obecným rozevřením puklin a průřezem 1D prvků. Programátorský zásah byl nutný ve většině modulů od načítání vstupních dat až po postprocesing.

Byla připravena vstupní data a provedeny ukázkové výpočty na postupně složitějších geometriích. Spolu s výpočty byl hodnocen vliv jednotlivých procesů na retardaci látek, nejvýznamnějším faktorem retardace byla ve většině studovaných případů především sorpce. Od problému realizace dynamických parametrů bylo ustoupeno z důvodu náročnosti a současně i z nedostatku experimentálních dat.

Provedené úpravy byly ve formě popisu vstupních souborů zdokumentovány a jsou součástí přílohy práce na CD a současně i k dispozici všem uživatelům softwaru Flow123d.

Na práci je možné v budoucnu navázat při řešení úloh na reálných sítích, při studiu citlivosti výsledků na vlivy nastavení parametrů konvekce, difuze, sorpce, duální porozity a především pak při studiu bezpečnosti a hodnocení rizik, které jsou pro hlubinné úložiště z hlediska bezpečnosti nejdůležitějším faktorem.

Dalším námětem budoucího pokračování je implementace hydrodynamické disperze do softwaru Flow123d, případně vytvoření jeho grafického uživatelského rozhraní. Vhodným tématem na rozšíření by byla také paralelizace kódu,

neboť současná implementace transportu je řešena sekvenčně, což rychlost výpočtu značně limituje.

Literatura

- [1] J. Křižáková, I. Maruška, *Komplexní modely dopravy*, 2007.
- [2] I. Maruška, M. Kuznězov, M. Pálek, *Modelování dopravy a její optimalizace*, 2010.
- [3] M. Maruška, *Discrete-time Model of Transport System in One-Dimensional Media*, 2010.
- [4] M. Maruška, *Single-Track Traffic Control*, 2010.
- [5] SWEDISH NUCLEAR SI AND WASTE MANAGEMENT CO. (SWINCO), *Report 97-20*, 1997.
- [6] SWEDISH NUCLEAR SI AND WASTE MANAGEMENT CO. (SWINCO), *Report 98-20*, 1998.
- [7] SWEDISH NUCLEAR SI AND WASTE MANAGEMENT CO. (SWINCO), *Report 99-20*, 1999.
- [8] SWEDISH NUCLEAR SI AND WASTE MANAGEMENT CO. (SWINCO), *Report 00-20*, 2000.
- [9] P. ČERNÝ, *Geometrie přímých dopravních systémů*, 2005.
- [10] K. Křižáková, *Typy dopravních systémů*, 2005.
- [11] <http://www.iaea.org/infocentre/news/story.aspx?news=20070101>, 2007.
- [12] J. Křižáková, *Modelování dopravy a její optimalizace*, 2010.

Literatura

- [1] J. KRÁLOVCOVÁ, J. MARYŠKA: *Kombinované modely proudění*
- [2] J. MARYŠKA, M. ROZLOŽNÍK, M. TŮMA: *Schur complement system in the mixed-hybrid finite element approximation of the potential fluid flow problem*
- [3] M. HOKR: *Disertační práce: Model of Flow and Solute Transport in Dual-porosity Media*
- [4] M. HOKR: *Skripta: Transportní procesy*
- [5] SWEDISH NUCLEAR FUEL AND WASTE MANAGEMENT CO: *Technical report 97-33*
- [6] SWEDISH NUCLEAR FUEL AND WASTE MANAGEMENT CO: *Technical report 97-20*
- [7] SWEDISH NUCLEAR FUEL AND WASTE MANAGEMENT CO: *Technical report 99-09*
- [8] SWEDISH NUCLEAR FUEL AND WASTE MANAGEMENT CO: *Technical report 99-23*
- [9] T. PAČES: *Geochemické problémy bezpečného ukládání radioaktivního odpadu v Českém masivu*
- [10] KOLEKTIV AUTORŮ: *Hydrogeologická zpráva projektu Melechov*
- [11] [HTTP://WWW.LIFELONG-LEARNERS.COM/PDE/APPLET/JBO/RUN.HTML](http://www.lifelong-learners.com/pde/applet/jbo/run.html): *JBONE - Interaktivní program pro výpočet konvekčně disperzních rovnic na 1D oblasti*
- [12] J. KOPAL: *Semestrální projekt: Transport radionuklidů v granitovém prostředí*

Literatura

- [1] ŠEMBERA, J., MARYŠKA, J., KRÁLOVCOVÁ, J., SEVERÝN, O.: *10. A novel approach to modelling of flow in fractured porous medium, Kybernetika (2007), Vol. 43/4, str. 577-588. ISSN 0023-5954*
- [2] MARYŠKA, J., ROZLOŽNÍK, M., TŮMA, M.: *Schur Complement Systems in the Mixed-hybrid Finite Element Approximation of the Potential Fluid Flow Problem, SIAM J. on Scientific Computing, 22 (2000), No. 2, pp. 704-723, ISSN 1064-8275*
- [3] HOKR, M.: *Model of Flow and Solute Transport in Dual-porosity Media, Ph.D. Thesis (2003), TUL*
- [4] HOKR, M.: *Transportní procesy, Skripta (2005), FM TUL*
- [5] BRUNO, J., CERA, E., DE PABLO, J., DURO, L., JORDANA, S., SAVAGE, D.: *SKB TR 97-33, Determination of radionuclide solubility limits to be used in SR 97. Uncertainties associated to calculated solubilities, Sweden*
- [6] OHLSSON, Y., NERETNIEKS, I.: *SKB TR 97-20, Diffusion data in granite. Recommended values, Sweden*
- [7] ANDERSSON, J.: *SKB TR-99-09, Data and data uncertainties. Compilation of data and data uncertainties for radionuclide transport calculations, Sweden*
- [8] LINDGREN, M., LINDSTRÖM, F.: *SKB TR-99-23, SR 97 - Radionuclide transport calculations, Sweden*
- [9] PAČES, T.: *Geochemické problémy bezpečného ukládání radioaktivního odpadu v Českém masivu, Geologický průzkum (1987)*
- [10] MARYŠKA, J. A KOL.: *Provedení geologických a dalších prací na testovací lokalitě Melechovský masiv 2. etapa, Průběžná zpráva 2004*

- [11] [HTTP://WWW.LIFELONG-LEARNERS.COM/PDE/APPLET/JBO/RUN.HTML](http://www.lifelong-learners.com/pde/applet/jbo/run.html):
*JBONE - Interaktivní program pro výpočet konvekčně disperzních rovnic
na 1D oblasti*
- [12] KOPAL, J.: *Transport radionuklidů v granitovém prostředí, Semestrální
projekt (2007), TUL*

V69/08M
+ CD