



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

# Modelování hydratace bentonitu v hlubinném úložišti při nehomogenním přítoku vody z horniny

## Autoreferát disertační práce

*Studijní program:* P3901 – Aplikované vědy v inženýrství  
*Studijní obor:* 3901V055 – Aplikované vědy v inženýrství  
*Autor práce:* **Ing. Ilona Škarydová**  
*Vedoucí práce:* doc. Ing. Milan Hokr, Ph.D.





## Prohlášení

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

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

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

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

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

Datum:

Podpis:



## Abstrakt

Plánování hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva je aktuálním problémem v České republice i ve světě. Pro jeho správnou funkčnost a bezpečnost je důležitá analýza procesů, které budou probíhat v jeho přírodních i inženýrských bariérách. Jedním z uvažovaných dějů je hydratace bentonitu, kterou se tato disertační práce zabývá na základě numerických simulací. Zaměřuje se přitom na nehomogenní přítok podzemní vody, který způsobuje nerovnoměrné syčení bentonitu a zapříčiňuje jeho netriviální chování (bobtnání, plasticita).

V práci je prokázána použitelnost méně obvyklé koncepce s nelineární difuzivitou závislou na stupni saturace, která ekvivalentně nahrazuje standardně používanou Richardsovu rovnici na modelech s netriviálně definovanými okrajovými podmínkami. Pomocí jejich různých variant je realizován vliv syčení puklinami a okolní horninovou maticí na hydrataci. Vyhodnocena je také citlivost úloh na uvažovanou propustnost okolní horniny a výsledky jsou v některých případech srovnány s měřenými daty, nebo s výsledky jiných výzkumných skupin. V rámci disertační práce bylo také demonstrováno řešení sdruženého hydro-mechanického problému.

Řešené modely vychází z rozsáhlých in situ experimentů „Bentonite Rock Interaction Experiment“ a „Prototype Repository“ realizovaných v rámci mezinárodního projektu „Task Force on Engineered Barrier Systems“.

**klíčová slova:** hydratace, bentonit, hlubinné úložiště vyhořelého jaderného paliva, numerické simulace, ANSYS

## Abstract

Planning a deep repository of spent nuclear fuel is a current issue of research groups not only in the Czech Republic. The analysis of processes, which will occur in its natural and engineered barriers, is necessary for the proper functionality and safety of the repository. One of the considered processes is bentonite hydration. Numerical simulations of bentonite hydration is the topic of this thesis, which focuses on the inhomogeneous groundwater inflow that causes non-uniform bentonite saturation and other non-trivial behaviour (plasticity, swelling).

This thesis demonstrates the applicability of a less common conception, with the non-linear diffusivity dependent on the degree of saturation, which approximates standardly used Richards' equation. Problems are simulated with different variants of non-trivial boundary conditions, which represent the influence of fractures or rock matrix on bentonite hydration. Sensitivity of the problems on the rock permeability is also evaluated. Some of the results are compared with measured data or with results of other research groups. A solution of the coupled hydro-mechanical problem is also demonstrated within the thesis.

Solved models are based on the large-scale in situ experiments „Bentonite Rock Interaction Experiment“ and „Prototype Repository“, which were realized within the international project „Task Force on Engineered Barrier Systems“.

**keywords:** hydration, bentonite, deep repository of spent nuclear fuel, numerical simulations, ANSYS

# Obsah

Abstrakt . . . . .	5
Abstract . . . . .	5
<b>Obsah</b>	<b>6</b>
<b>1 Úvod</b>	<b>7</b>
1.1 Cíle disertační práce . . . . .	9
<b>2 Současný stav zkoumané problematiky</b>	<b>10</b>
2.1 Metody pro popis a simulaci rozpukaného horninového prostředí . . . . .	10
2.2 Modely dějů v částečně saturovaném prostředí . . . . .	11
2.3 Experimenty popisující hydrataci bentonitu . . . . .	13
<b>3 Fyzikální popis chování bentonitu a dalších materiálů</b>	<b>15</b>
3.1 Popis hydraulického chování pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou . . . . .	15
3.2 Popis mechanického chování . . . . .	16
3.3 Materiálové parametry použité v modelech . . . . .	16
<b>4 Vybrané výsledky – modely hydratace bentonitu</b>	<b>19</b>
4.1 Modelování hydratace bentonitu podle experimentu BRIE . . . . .	19
4.2 Modelování hydratace bentonitu podle experimentu Prototype Repository . . . . .	27
<b>Závěr</b>	<b>32</b>
Přínosy disertační práce . . . . .	34
<b>Literatura</b>	<b>37</b>
Seznam publikací autorky . . . . .	37

# 1 Úvod

Práce se zabývá aplikacemi numerických simulací pro studium termo-hydro-mechanických (THM) jevů v hlubinném úložišti (HÚ) vyhořelého jaderného paliva (VJP), jehož plánování je již několik let aktuální otázkou nejen ve světě, ale také v České republice. Konkrétně se práce zaměřuje na proces hydratace inženýrské bariéry HÚ tvořené bentonitem a na děje probíhající na jeho rozhraní s přírodní bariérou (hostitelskou horninou). Proces hydratace bentonitu posuzujeme pomocí numerických simulací na různě podrobných modelech v různých měřítkách, některé jsou definovány uměle, některé vychází z reálných laboratorních a in situ experimentů.

Všeobecnou potřebou pro bezpečnost HÚ je schopnost predikce fyzikálních i chemických dějů, které budou v jednotlivých bariérách úložiště probíhat. Pro většinu jevů je predikce ve velké míře možná díky známému fyzikálnímu a matematickému popisu pomocí rovnic a prostřednictvím známých modelů a jejich numerických řešení. Přesto díky složitým vlastnostem bentonitu nelze jeho chování v současném stavu poznání dostatečně přesně vyjádřit a to kvůli různým nejistotám, ke kterým patří také nerovnoměrné sycení bentonitu.

Výzkum kolem jevů v bentonitu je rozsáhlý a zahrnuje mnoho vědních oborů přesahujících zaměření této práce (geotechnika, geochemie, mineralogie – např. různá minerální složení bentonitu, stupeň kompaktování a tvar bentonitových pelet, kterými se tato práce nezabývá), ale v České republice je dalšími pracovišti pokryta velká část těchto výzkumných témat.

Z oblasti výzkumu THM jevů v bentonitu jsou hlavním prostředkem k makroskopickému pozorování jeho sycení a bobtnání nejrůznější experimenty. V počátcích výzkumu souvisejícího s analýzou HÚ, byly nejdříve definované jednodušší laboratorní testy, které uvažovaly rovnoměrný přítok vody. Se vzrůstajícími znalostmi a zkušenostmi se začaly realizovat i složitější terénní měření a experimenty přímo v horninovém prostředí v rámci podzemních laboratoří, které uvažují nerovnoměrné sycení bentonitu.

Dosavadní simulovaná řešení THM jevů v bentonitu vždy navazovala na experimenty a nebyla explicitně soustředěná na nehomogenní přítok podzemní vody z okolní horniny do bentonitu. Laboratorní experimenty menšího rozsahu byly obvykle realizovány cíleně s uvažováním rovnoměrné hydratace (v malém měřítku je provedení i vyhodnocení nerovnoměrného přítoku problematické). Terénní experimenty jsou definovány podobným způsobem, kdy je sycení realizováno buď zvodněnou vrstvou nebo pomocí zařízení distribuujícího vodu. Pokud je v terénním experimentu uvažován přirozený nehomogenní přítok (prostřednictvím puklin nebo jiných nespojitostí), nebyla dosud k dispozici měřená data v tak komplexní podobě, aby bylo modelem možné postihnout chování experimentu v zobecnitelné formě.

Podrobné studium sycení bentonitu (a jeho důsledky na další THMC procesy) je v posledních letech zájmem odborných skupin zabývajících se plánováním HÚ v zahraničí.

Tímto způsobem byly definovány modelové úlohy pro řešení procesů probíhajících v experimentech pomocí numerických simulací v projektu „Task Force on Engineered Barrier Systems“ (TF EBS) v roce 2010. Jeho řešením se paralelně s významnými zahraničními týmy účastní i pracoviště TUL, se značným podílem doktorandky a školitele. Řešené téma je aktuálním vědeckým problémem v tomto oboru a některé výsledky v disertační práci byly průběžně konfrontovány s výsledky ostatních skupin (např. švédské SKB).

Disertační práce obsahuje různé pohledy na postihnutí nehomogenního přítoku vody z horniny do bentonitu – geometrickou reprezentací, měřítkem, mírou nejistoty měřených dat. Použitý model je před použitím na složitější podmínky terénních experimentů validován na různých jednodušších modelech, ať už porovnáním s výsledky z jiných simulačních nástrojů, nebo porovnáním s laboratorními daty (ve stejnoměrných podmínkách, např. 1D symetrie). Tímto postupem je ověřen obecný koncept a je možné se lépe soustředit na konkrétní reprezentace okrajových podmínek.

## **Struktura disertační práce**

V následující části bude popsána struktura disertační práce – obsah rozlišený podle jednotlivých kapitol.

Úvodní kapitola vymezuje téma disertační práce a popisuje její cíle. Pro pochopení souvislostí je zde uveden i krátký popis hlubinného úložiště, jeho koncepce, funkce a jeho jednotlivých bariér.

Kapitola 2 popisuje současný stav zkoumané problematiky, metody, které se využívají k numerickým simulacím v horninovém prostředí a v prostředí bentonitu. V závěru kapitoly jsou popsány také vybrané laboratorní i terénní experimenty realizované za účelem výzkumu syčení bentonitové bariéry.

Kapitola 3 uvádí konkrétní použitou koncepci pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou, koncepci použitou pro řešení procesu bobtnání bentonitu a dále aplikované konstituční vztahy a materiálové parametry. V kapitole 4 je krátce popsána metodika pro definici modelů v horninovém prostředí a také použitá numerická metoda a výpočetní software ANSYS.

Další kapitoly se zabývají konkrétními numerickými simulacemi provedenými v rámci této práce. Nejprve jsou představeny v kapitole 5 testovací úlohy popisující procesy na rozhraní různě saturovaného bentonitu a horniny.

Stěžejní část tvoří kapitoly 6 a 7, ve kterých jsou popsány simulované problémy, jejich definice a řešení. Kapitola 6 se zabývá modely vztahujícími se k experimentu „Bentonite Rock Interaction Experiment“ (BRIE), kapitola 7 pak simulacemi experimentu „Prototype Repository“ (PR).

V závěru je práce shrnuta a jsou zde popsány i její přínosy a návrhy navazujících prací. V následujících částech je uvedena použitá literatura, seznam publikací autorky a obrazové přílohy.



## 1.1 Cíle disertační práce

Disertační práce je zaměřena na zkoumání procesu hydratace bentonitu v HÚ prostřednictvím numerických simulací. Oproti dosavadním pracím se zaměřuje na podmínky nehomogenního přítoku podzemní vody (podmínky nerovnoměrného sycení).

- Prostřednictvím literární rešerše shrnout vybrané postupy a metody, které se využívají při simulacích v horninovém prostředí a v bentonitu.
- Popsat a charakterizovat proces sycení bentonitu prostřednictvím numerických simulací s nehomogenním přítokem podzemní vody s využitím dat z realizovaných experimentů
  - definovat modely, které vyjadřují různé možnosti způsobů hydratace pomocí aplikovaných okrajových podmínek,
  - přispět k porozumění a interpretaci dat ze souvisejících experimentů.
- Zhodnotit využitelnost a míru efektivnosti použité alternativní koncepce pro simulaci sycení bentonitu pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou
  - zhodnotit možnosti a omezení koncepce pro popis hydratace bentonitu,
  - zhodnotit možnosti a omezení využití zjednodušeného popisu pro modelování sdruženého hydro-mechanického procesu v bentonitu.
- Prostřednictvím numerických simulací přispět k poznání procesů, které probíhají v bentonitu a na rozhraní hornina-bentonit při jeho sycení.

Simulace hydratace bentonitu s případnými dalšími vlivy provedené v rámci disertační práce navazují na mezinárodní projekt „Task Force on Engineered Barrier Systems“ (TF EBS), který sdružuje několik týmů zabývajících se modelováním procesů v inženýrských bariérách plánovaného hlubinného úložiště.

## 2 Současný stav zkoumané problematiky

V této kapitole popíšeme metody a postupy vhodné pro popis proudění vody v částečně saturem prostředí včetně případných sdružení s dalšími procesy. Nejprve se však zaměříme na přístupy pro simulace procesů v rozpukané hornině, protože horninové prostředí, které obsahuje pukliny či jiná porušení, představuje médium, jehož prostřednictvím dochází k hydrataci bentonitu.

K rešerši byla využita řada literatury, které jsou v plném rozsahu citovány v disertační práci, autoreferát uvádí pouze vybrané zdroje.

### 2.1 Metody pro popis a simulaci rozpukaného horninového prostředí

Horninové prostředí je specifické díky přítomnosti nespojitostí (puklin, zlomů, mikrotrhlin atd.). Existuje řada metod, které dokáží pukliny do modelové oblasti zahrnout a pracovat s nimi, tyto metody jsou založeny na různém vyjádření puklin (explicitním i implicitním popisu [20]). V simulacích procesů probíhajících v horninovém prostředí uvedených v literatuře je často využívána metoda konečných prvků [33] a různé její obměny (rozšířená FEM, smíšená-hybridní FEM), ale i další numerické metody (metoda oddělených elementů, metoda konečných diferencí, metoda konečných objemů, atd.).

Základním a nejjednodušším postupem, v rámci metody konečných prvků, který byl poprvé použit v [17], je definice pukliny přímo v konečně-prvkové síti. Puklinovým prvkům jsou přiřazeny rozdílné vlastnosti oproti horninové matici, což zajišťuje jednoduchou definici, ale v praxi je tento přístup použitelný pouze pro malý počet puklin – kvůli složitější definici sítě a nutnosti lokálního zjemnění.

Náročnější na definici geometrie je vyjádření puklin jako samostatných objektů v síti, které je implementováno např. v komerčním systému FEFLOW [13], pro simulace proudění podzemní vody a transportu látek a tepla v porézních médiích (plně nebo částečně saturem). Pukliny jsou zde zahrnuty na úrovni konečně-prvkové diskretizace pomocí tzv. „Discrete Feature Elements“. Na podobném principu je založeno vyjádření puklin jako tzv. „elementů nižších dimenzí“ v nástroji Flow123d [7] vyvíjeném na TUL. Proudění je v tomto nástroji implementováno pomocí smíšené hybridní formulace FEM, transport rozpustěných látek pak pomocí dvou metod: metody konečných objemů nebo nespojitě Galerkinovy metody. Výhodou přístupu Flow123d oproti FEFLOW je možnost omezeného použití elementů nižších dimenzí i nezávisle na topologii sítě vyšší dimenze (tzv. nekompatibilní spojení).

Vyjádření téměř libovolného tvaru pukliny zcela nezávisle na diskretizaci horninové matrice umožňují metody ze skupiny rozšířených konečných prvků (Extended Finite Element Method – XFEM) [15]. Tyto metody jsou založeny na FEM, kterou zobecňují

ve smyslu rozšíření prostoru řešení i pro řešení s předpokládaným nespojitým chováním v malé části oblasti. Metody umožňují vyjádření jak silných nespojitostí (skok v hodnotách veličiny), tak slabých nespojitostí (skok v hodnotách gradientu veličiny). Hlavní výhodou XFEM je v konstrukci konečně-prvkové sítě, kdy nemusíme přizpůsobovat elementy reprezentující horninovou matici nespojitostem, které na hlavní síti nezávisí a jsou definovány odděleně. Horninová matrice je definována jako FEM kontinuum, modifikována je implementací tvarových funkcí elementů, do kterých nespojitost zasahuje. Metody ze skupiny XFEM se využívají k simulacím mechaniky rozpukané horniny, časovému vývoji puklin a využitím metody pro proudění podzemní vody se zabývá i pracoviště TUL [14].

Pro velké množství puklin (a husté puklinové sítě) je vhodné spojení kontinua a diskrétní puklinové sítě (Discrete Fracture Network – DFN), do vlastností kontinua přitom mohou být zahrnuty zprůměrované vlastnosti horninové matrice a nejmenších obsažených puklin. Tento přístup je implementován např. v simulačním nástroji ConnectFlow [2], který obsahuje modul NAMMU pro modelování porézního kontinua a modul NAPSAC pro reprezentaci diskrétní puklinové sítě.

K rozpukané hornině je také možné přistupovat jako k velkému množství bloků oddělených puklinami. Tento koncept je implementován ve velké skupině metod oddělených elementů (Discrete Element Methods – DEM) [12], které je možné použít zejména k mechanické analýze nespojitých materiálů zahrnující i horninové prostředí s puklinami. Jako nejznámější zástupce těchto metod můžeme uvést Discontinuous Deformation Analysis (DDA) založenou na FEM pro výpočet mechaniky hornin. Díky implicitnímu vyjádření (ve smyslu řešení soustavy rovnic v každém časovém kroku) je tato metoda stabilní, což však zapříčiňuje větší požadavky na paměť při ukládání matice soustavy [20]. Druhou metodou je Distinct Element Method (DEM), což je naopak explicitní metoda založená na metodě konečných diferencí s posunutími jako neznámými a kontaktními elementy pro pukliny (na rozhraní horninových bloků). Metoda je implementována např. v nástrojích UDEC, 3DEC [10].

## 2.2 Modely dějů v částečně saturovaném prostředí

Pro popis chování bentonitu jako jílovité zeminy se využívá řada poznatků z mechaniky zemin. Protože je však jeho chování v řadě aspektů specifické (plastičnost, bobtnací schopnost), bylo nutné některé metody zobecnit. V případě chování bentonitu bylo třeba zjednodušit jeho popis a obecně používané metody přizpůsobit, aby vystihovaly jeho chování. Bentonit je v simulacích ve většině případů uvažován jako částečně nasycené prostředí. V následujících částech popíšeme přístupy pro simulace hydraulického i mechanického chování bentonitu.

### 2.2.1 Přístupy pro modelování hydraulického chování bentonitu

Pro popis proudění vody v prostředí zemin se obecně využívají tzv. vícefázové modely, které popisují proudění vody prostřednictvím kapalně a plynné fáze [11]. V různých simulačních nástrojích jsou vícefázové modely různě definovány a ne vždy zahrnují shodné vlivy.

Jedna z variant uvažuje dvousložkové proudění ve dvou fázích (voda a vzduch, obě média v plynné i kapalně fázi). Takový model je implementován např. v softwaru Code\_Bright [25]. Vyjádření přenosu vodní páry je různé, ale většinou je založeno na popisu

difuze vodních par pomocí Fickova zákona. Transport tepla a vlhkosti ve formě páry a imobilní vody umožňuje software ISERIT [16] vyvíjený na TUL.

Pokud v procesu hydratace bentonitu neuvažujeme měnící se teplotu, je možné proces zjednodušit a zanedbat přenos vody pomocí vodních par, který není v případě nižších teplot významný. Některé simulační programy zanedbávají přenos vody pomocí plynné fáze. Pokud v modelech není plynná fáze vůbec uvažována, je možné proces hydratace popsat jako proudění v částečně saturovaném prostředí podle Richardsovy rovnice [27], což je standardně využívaný popis pro hydrataci bentonitu (např. FEFLOW [13]).

Richardsovu rovnici je podle [4] navíc možné upravit do tvaru difuzní rovnice s nelineární difuzivitou, která je v popisu průběhu hydratace plně ekvivalentní, s malým omezením při stavu plné saturace, které však pro účely práce není významné (podrobněji v kapitole 3.1). Tento přístup má velkou výhodu – nevyžaduje využití specializovaného simulačního nástroje, stačí software, ve kterém lze definovat model podle difuzní rovnice s nelineární difuzivitou závislou na stavové proměnné. Konceptně blízkým je také přístup prezentovaný v [24], který spojuje dva koncepty (advektivní model a model pro difuzi vodní páry) pro popis hydratace bentonitu.

Jedním z důležitých vztahů pro proudění v částečně saturovaném prostředí je tzv. retenční křivka, která vyjadřuje závislost mezi sacím tlakem a objemovou vlhkostí [11]. Tvar retenční křivky je dán geometrickými vlastnostmi pórů, ale závisí i na vlastnostech kapalně fáze. Takto definovaná retenční křivka je používána pro zeminy, kde je voda zadržována vlivem kapilárních sil. U bentonitu, i když je fyzikální princip retence odlišný, je možné jeho schopnost zadržovat vodu retenční křivkou také dobře vystihnout. K nejčastěji využívaným retenčním křivkám patří tzv. van Genuchten retenční křivka (popsaná v kapitole 3.1, vztah (3.1)).

## 2.2.2 Přístupy pro modelování mechanického chování bentonitu

Při procesu hydratace bentonitu dochází k mechanickým změnám v materiálu – bentonit bobtná. V průběhu hydratace se mění i jeho mechanické vlastnosti, proto je nutné i při simulacích mechanických procesů k bentonitu přistupovat specializovanými metodami.

Existuje řada konstitučních modelů plasticity, které popisují mechanické chování jílovitých zemín. Nejjednodušší materiálové modely uvažují pouze plně saturovaný stav materiálu [6], což je pro simulace sledující průběh hydratace nevyhovující.

Pro částečně saturovaný bentonit jsou základními modely tzv. modely Cam-Clay [28]. Pro slabě nebo středně bobtnavé materiály byl definován tzv. Barcelona Basic Model (BBM) [1], který na modely Cam-Clay navazuje. Tento model je založen na uvažování plastického chování se zpevněním a využívá dvě nezávislé sady napětových proměnných. Dokáže tak vystihnout řadu základních vlastností, které jsou pro částečně saturovaný materiál charakteristické a dříve musely být ošetřeny samostatnými modely. BBM má svá omezení pro použití v různých aplikacích – díky nespojitosti okolo průniku dvou ploch plasticity se stává složitějším na implementaci.

Tato omezení se snaží ošetřit modifikovaný BBM [26], který byl vytvořen za účelem zjednodušení implementace a umožnění simulace elasto-plastického chování během cyklů mechanického a hydraulického zatěžování. Modifikace BBM spočívá např. v definici hladké plochy plasticity v prostoru napětí – sací tlak a aplikace dvou ploch plasticity.

V závislosti na možnostech simulačního nástroje lze využít zjednodušený popis pomocí elastického modelu s nelineárním Youngovým modulem pružnosti podle [5] a [19].

Publikace [5] uvádí experimentálně získaná data a publikace [19] potom jejich využití v simulacích. Tento způsob vyjádření mechanického chování je použit v modelech v této práci, je tedy podrobněji popsán v kapitole 3.2. Pomocí tohoto přístupu bylo již dříve simulováno bobtnání bentonitu v rámci prací na projektu TF EBS (J. Novák [18]), ale na rozdíl od simulací v této práci byla použita konstantní hodnota difuzivity. I když je skutečné chování bentonitu lépe vystiženo pomocí sofistikovaných modelů typu BBM, v případě této práce není simulace sdružených hydro-mechanických (HM) problémů hlavním tématem, proto model s nelineárním modulem pružnosti dostačuje. Pomocí simulací chceme ukázat, že takto definovaný materiálový model dokáže poskytnout náhled na mechanické chování bentonitu při hydrataci a zároveň s určitou mírou přesnosti i kvalitativně popsat proces bobtnání.

## 2.3 Experimenty popisující hydrataci bentonitu

K zpřesnění popisu chování bentonitu při hydrataci byly realizovány nejrůznější zkoušky a měření, ať už menšího rozsahu (laboratorní), nebo rozsáhlé terénní experimenty. Získaná data jsou využívána nejen jako podklady pro numerické simulace, ale také pro validaci navržených modelů. Řada realizací a následných simulací byla provedena pod zastřešením projektu TF EBS vedeným švédskou organizací SKB ve spolupráci s několika výzkumnými týmy zabývajícími se výzkumem bariér HÚ.

V počátcích výzkumu souvisejícího s ukládáním VJP bylo chování bentonitu testováno na jednodušších laboratorních experimentech s homogenní hydratací (rovnoměrně rozložený zdroj vody po celém povrchu vzorku). Takové chování popisují např. testy „BM1.1“ až „BM1.3“ [29], které byly definovány s tepelným a hydraulickým zatěžováním a omezeným prostorem pro bobtnání, aby se přiblížily podmínkám v HÚ. I přes pečlivou definici modely navazující na výše uvedené experimenty kvůli obsaženým nejistotám většinou nepřinesly úplnou shodu s měřenými daty.

Ze zkušeností z dříve realizovaných experimentů a jejich simulací čerpá např. laboratorní Water Uptake Test, který byl proveden paralelně k in situ experimentu BRIE. Při jeho přípravě se podařilo eliminovat řadu nejistot tak, že výsledky modelů simulujících průběh testu vykazují daleko lepší shodu jak s měřenými daty, tak mezi týmy TF EBS. Vybrané výsledky pro modely definované v rámci disertační práce jsou popsány v kapitole 4.1.1.

Z terénních zkoušek se řízeným sycením můžeme uvést: „Buffer container experiment“ (BM2.1), případně „Canister Retrieval Test“ (CRT) [22] – oba uvažující vertikální uspořádání kontejneru v hornině, utěsnění bentonitovým bufferem a homogenní přítok vody. Obecnější a zároveň i náročnější na realizaci jsou rozsáhlé terénní experimenty v podzemních laboratořích v Äspö ve Švédsku, v Grimsel ve Švýcarsku a v podmínkách České republiky ve štolě Josef popsané v dalším textu.

Z podzemní laboratoře Äspö zmíníme dva rozsáhlé experimenty: Prototype Repository a BRIE, kde je kladen důraz na nerovnoměrnou saturaci bentonitu horninovým prostředím – nehomogenními přítoky. Prototype Repository [21] je jedinečný experiment v reálném měřítku, který simuluje chování hlubinného úložiště KBS-3V koncepce v podmínkách horninového prostředí. Snaží se komplexně vystihnout chování bariér HÚ, včetně tepelného výkonu, který vyhořelé jaderné palivo vydává (neuvažuje radioaktivitu). Simulace tohoto experimentu probíhají v současnosti a některé výsledky byly již publikovány např. v [9]. Podrobnější popis experimentu a provedené simulace jsou popsány v disertační práci.

Experiment BRIE (Bentonite Rock Interaction Experiment) [8] se podobně jako Pro-

totype Repository zabývá reálnými podmínkami HÚ v podobném nebo menším měřítku. Na rozdíl od Prototype Repository se však snaží v detailu vystihnout procesy souvisejícími s hydratací bentonitu na rozhraní bentonit-hornina bez tepelného a mechanického vlivu. Na simulacích souvisejících s BRIE se v současnosti pracuje, souhrné a souvislé výsledky nebyly ještě publikovány.

Další in situ experimenty byly provedeny ve švýcarské podzemní laboratoři Grimsel (difuze a migrace látek v bariérách HÚ, testy v rámci FEBEX projektu). V českém prostředí to jsou testy (laboratorní i terénní) realizované Centrem experimentální geotechniky (CEG) Fakulty stavební ČVUT ve štolě Josef. Konkrétně můžeme zmínit z terénních měření např. experiment Mock-up Josef [32]. V tomto experimentu nejsou zohledněny podmínky nerovnoměrného sycení, ale jsou zde v rámci jeho monitoringu podrobněji sledovány další jevy (tepelné a mechanické zatěžování a děje probíhající v hornině v blízkém okolí kontejneru).

Další experimenty jsou zaměřeny na výzkum bobtnání bentonitu (např. závislosti bobtnacího tlaku a deformace na počátečních podmínkách bentonitu), nebo na experimentální výzkum bobtnání bentonitu a jeho potenciální schopnost utěsnit pukliny v hornině [30]. Bobtnání bentonitu však není hlavním tématem disertační práce, nebudeme se jím tedy podrobněji zabývat.

## 3 Fyzikální popis chování bentonitu a dalších materiálů

V této kapitole je popsána metoda řešení – konkrétní fyzikální model pro hydraulické a mechanické chování bentonitu, který je využit pro simulace hydratace bentonitu v této práci. Představen je i elasto-plastický model simulující bobtnání bentonitu aplikovaný ve sružených HM modelech. Dále jsou uvedeny nejdůležitější hydraulické a mechanické materiálové parametry a další data nezbytná k definici modelů.

### 3.1 Popis hydraulického chování pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou

Proudění v částečně saturovaném prostředí se je možné popsat několika přístupy, nejvyužívanější uvádí kapitola 2.2.1. V simulacích zanedbáváme vliv vodní páry na hydrataci prostředí, k popisu využíváme Richardsovu rovnici [27]. Richardsovu rovnici je možné podle [4] vyjádřit pomocí rovnice s nelineární difuzivitou, kde jako neznámou veličinu uvažujeme stupeň saturace. Tato formulace je při průběhu procesu hydratace plně ekvivalentní ke klasickému vyjádření s tlakem jako neznámou veličinou. Omezení difuzní formulace nastává při stavu plné saturace – klasický model tyto stavy popisuje pomocí kladných hodnot tlaku, u difuzního modelu je plná saturace popsána jedinou hodnotou:  $S_l = 100 \%$ , což odpovídá tlaku atmosferickému. Chování materiálu při plné saturaci však v simulacích nestudujeme, a proto je užití difuzního modelu plně dostačující.

Výhodou tohoto vyjádření je zejména možnost jeho využití ve velkém množství simulačních nástrojů. Není třeba specializovaný program, stačí, pokud výpočetní software umožňuje řešení difuzní rovnice s nelineární difuzivitou. Další předností difuzního modelu je snadnější realizace sruženého procesu v některém z multifyzikálních výpočetních nástrojů, kde opět nejsou třeba specializované funkce.

#### Difuzní rovnice s nelineární difuzivitou

Formulaci difuzní rovnice lze získat ekvivalentními úpravami výše zmíněné Richardsovy rovnice, kterou získáme dosazením Darcy-Buckinghamova zákona do rovnice kontinuity. V následujícím textu popíšeme tvar nelineární difuzní rovnice pro horninu i bentonit, která je podrobněji odvozena v disertační práci.

K vyjádření relativní propustnosti  $k_r$  (1) v závislosti na stupni saturace  $S_l$  (1) se pro bentonit využívá mocninný zákon nebo v případě horniny s puklinou vyjádření podle van Genuchtena. Dále je využita van Genuchtenova retenční křivka s parametry  $p_0$  (Pa) a  $\lambda$  (1)

a atmosferickým tlakem  $p_g$  (Pa), která je popsána následujícím vztahem

$$S_l(p_l) = \left( 1 + \left( \frac{p_g - p_l}{p_0} \right)^{\frac{1}{1-\lambda}} \right)^{-\lambda} \quad (p_l < p_g). \quad (3.1)$$

Výsledný tvar difuzní se stupněm saturace  $S_l$  jako neznámou veličinou rovnice a s nelineární difuzivitou má pro bentonit následující tvar

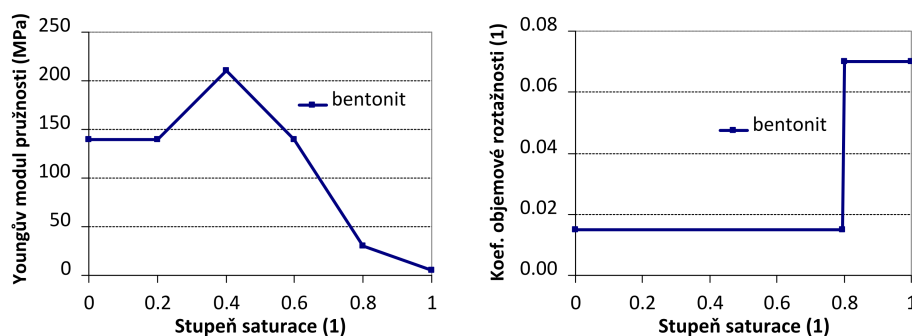
$$\frac{\partial S_l}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{k}{n \cdot \mu} S_l^3 \frac{p_0}{\lambda} (1 - \lambda) \left( S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} S_l^{-\frac{1-\lambda}{\lambda}} \right) \nabla S_l \right]. \quad (3.2)$$

Kompletní difuzní rovnice pro horninu, která se ve stejném tvaru využívá i pro puklinu, má následující tvar

$$\frac{\partial S_l}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{k}{n \cdot \mu} \sqrt{S_l} \left( 1 - \left( 1 - S_l^{\frac{1}{\lambda}} \right)^\lambda \right)^2 \frac{p_0}{\lambda} (1 - \lambda) \left( S_l^{-\frac{1}{\lambda}} - 1 \right)^{-\lambda} S_l^{-\frac{1-\lambda}{\lambda}} \right) \nabla S_l \right]. \quad (3.3)$$

## 3.2 Popis mechanického chování

Mechanické chování bentonitu v modelech popisujeme podle [19] a [5]. Jedná se o elasto-plastický materiálový model, jehož vlastnosti se mění se změnou nasycení, podrobněji je popsán v disertační práci. Řídící rovnicí pro mechanické chování jsou standardní vztahy (Hookeův zákon spolu s rovnicemi rovnováhy a vztahem pro malé deformace). Hodnota nelineárního Youngova modulu pružnosti (Obr.3.1) závisí na stupni saturace. Při stavu nasycení okolo 40 % je hodnota modulu pružnosti nejvyšší a následný výrazný pokles k nule popisuje „přepnutí do plastického stavu“ pro téměř plně saturovaný bentonit. Bobtnání následkem přísunu vody do bentonitu je vyjádřeno koeficientem objemové roztažnosti v bilineárním tvaru. Roztažnost bentonitu je rovněž závislá na stupni saturace a je zobrazena v grafu na Obr. 3.1 vpravo.



Obr. 3.1: Mechanické parametry bentonitu – Youngův modul pružnosti a koeficient objemové roztažnosti, převzato z [5] a z [19] a upraveno

## 3.3 Materiálové parametry použité v modelech

Materiálové parametry budou popsány podle navržených vztahů z experimentu BRIE z definice Task 8 [3] – z takto definovaného materiálového modelu vycházíme ve většině



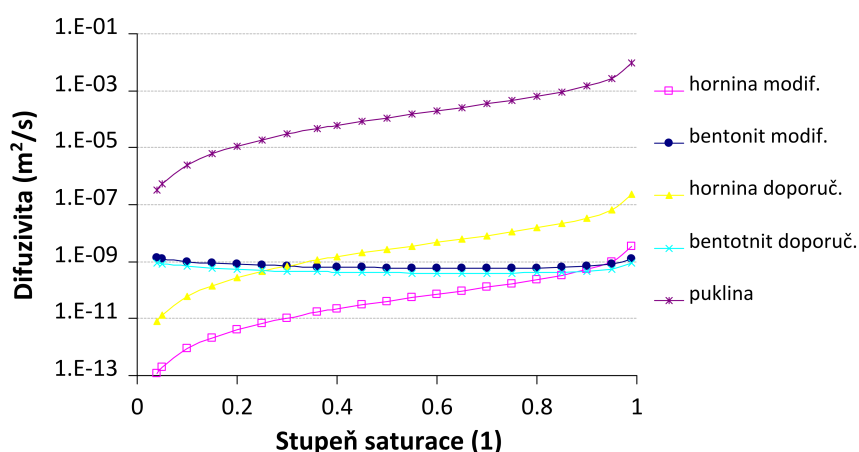
provedených simulací. Pokud se v některých problémech materiálové vlastnosti liší (ať už pro přítomnost bentonitu v jiném počátečním stupni saturace, v jiné formě, stupni kompaktování), je tato skutečnost uvedena přímo v popisu řešení. Vždy je však v modelech uvažován silně bobtnavý bentonit wyomingského typu MX-80, který byl v obou experimentech BRIE a Prototype Repository použit.

## Bentonit

Publikace [3] uvádí některé doporučené hodnoty parametrů pro bentonit. V testovacích výpočtech v kapitole 6.4 při kalibraci na referenční výpočet však byly v rámci této práce navrženy jiné – modifikované hodnoty propustnosti bentonitu, pro které byla dosažena vyšší shoda s referenčními výsledky, viz Tab. 3.1.

Graf na Obr. 3.2 zobrazuje závislosti difuzivity bentonitu na stupni saturace, které jsou získané dosazením parametrů z Tab. 3.1 do vztahů uvedených v kapitole 3.1. Porovnány jsou difuzivity bentonitu, horniny i pukliny v logaritmickém měřítku pro modifikované i doporučené parametry. Z grafu je patrné, že průběh difuzivity bentonitu se změnil se změnou parametrů pouze minimálně, průběhy pro horninu a puklinu mají shodný tvar posunutý ve směru osy  $y$ .

Mechanické chování bentonitu vyjádřené pomocí elastického materiálu s nelineárním modulem pružnosti závislým na stupni saturace (Obr. 3.1) je popsáno výše v kapitole 3.2. „Plastické“ chování bentonitu reprezentuje pokles modulu pružnosti při vyšším stupni saturace. Dalším materiálovým parametrem je Poissonova konstanta, která je pro bentonit rovna hodnotě 0,3. Vztah mezi objemovou změnou bentonitu a stupněm saturace popisuje koeficient objemové roztažnosti (Obr. 3.1 vpravo), jenž při přibližně 80% nasycení skokově vzroste z hodnoty 0,015 na hodnotu 0,07. Velikosti jednotlivých parametrů popisujících mechanické chování bentonitu, spolu s parametry horniny a pukliny jsou uvedeny v Tab. 3.2.



Obr. 3.2: Difuzivita pro bentonit, horninu a puklinu v závislosti na stupni saturace, zobrazeny doporučené a modifikované průběhy v logaritmickém měřítku

Tab. 3.1: Materiálové parametry pro výpočet difuzivity,  $p_0$ ,  $\lambda$  = parametry retenční křivky,  $k$  = propustnost,  $n$  = pórovitost,  $\mu$  = dynamická viskozita vody

Materiál	$p_0$ (MPa)	$\lambda$ (1)	$k_{dopor.}$ (m <sup>2</sup> )	$k_{modifik.}$ (m <sup>2</sup> )	$n$ (1)	$\mu$ (Pa·s)
Bentonit	9,23	0,3	$6,4 \cdot 10^{-21}$	$9,5 \cdot 10^{-21}$	0,438	$10^{-3}$
Hornina	1,74	0,6	$6,0 \cdot 10^{-20}$	$9,0 \cdot 10^{-22}$	0,003	$10^{-3}$
Puklina	1,74	0,6	–	$2,5 \cdot 10^{-15}$	0,003	$10^{-3}$

Tab. 3.2: Hodnoty materiálových parametrů pro určení mechanického chování

Materiál	Youngův modul pružnosti (Pa)	Poissonova konstanta (1)	Koef. objemové roztažnosti (1)
Bentonit	Obr. 3.1	0,3	Obr. 3.1
Hornina	$6 \cdot 10^{10}$	0,3	$10^{-10}$
Puklina	$6 \cdot 10^5$	0,3	$10^{-10}$

## Horninová matrice

Hornina je v modelech reprezentována kontinuem s explicitně vyjádřenými puklinami s předpokládaným významným vlivem na sycení bentonitu. Pokud je hornina v modelu přímo zahrnuta, je v počátečním čase plně nasycená. Stejně jako pro bentonit je pro horninu použit shodný matematický popis jako pro bentonit.

Propustnost hornin se zdrojů uvedených v disertační práci v oblasti podzemní laboratoře v Äspö pohybuje v rozmezí  $10^{-21}$  až  $10^{-17}$  m<sup>2</sup>. Toto široké rozmezí závisí hlavně na počtu a četnosti puklinových zón v místě, kde bylo prováděno měření. Parametry retenční křivky pro horninovou matici byly převzaty z [3]. Použitá kalibrovaná hodnota propustnosti je pak dolní hranici doporučeného rozmezí. Horninová matrice je poměrně homogenní a hodnotu pórovitosti uvažujeme na úrovni 0,3 % [31]. Z mechanického hlediska považujeme horninu za elastické kontinuum s Youngovým modulem pružnosti o velikosti  $6 \cdot 10^{10}$  Pa a Poissonově konstantě 0,3. Je uvažována nulová objemová roztažnost horniny vlivem nasycení, ale kvůli požadavkům výpočetního nástroje musela být nastavena hodnota různá od nuly, viz Tab. 3.2.

## Pukliny

Pukliny jsou v modelech reprezentovány kontinuem, které se liší materiálovými parametry od ostatních částí modelu. Puklinu uvažujeme na počátku simulací plně nasycenou. Propustnost pukliny je v Tab. 3.1 uvedena o 7 řádů vyšší než je propustnost horniny, ale testy na osově symetrických modelech v kapitole 6 ukázaly, že pokud je propustnost materiálu  $100\times$  vyšší, nemá jeho další zvyšování na hydrataci bentonitu v uvedených modelech vliv. Z mechanického hlediska je puklina reprezentována elastickým materiálem s parametry podle Tab. 3.2. Poissonova konstanta a koeficient objemové roztažnosti jsou voleny stejně jako pro horninu, hodnota Youngova modulu pružnosti je o pět řádů nižší, což vyjadřuje snazší deformovatelnost.

## 4 Vybrané výsledky – modely hydratace bentonitu

V této kapitole představíme vybrané simulace sycení bentonitu související s rozsáhlými terénními experimenty „Bentonite Rock Interaction Experiment“ a „Prototype Repository“. Těmto modelům předcházela řada testovacích úloh, např. simulace procesů na rozhraní bentonitu a žuly v kapitole 5 v disertační práci a další testovací simulace vycházející z experimentu BRIE v kapitolách 6.2 až 6.4 disertační práce.

Všechny modely jsou řešeny pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou závislou na stupni saturace, která je popsána v kapitole 3.1. Použity jsou modifikované materiálové parametry z Tab. 3.1. Simulačním nástrojem je výpočetní systém ANSYS, který je založený na metodě konečných prvků.

### 4.1 Modelování hydratace bentonitu podle experimentu BRIE

Tato studie navazuje na experiment „Bentonite Rock Interaction Experiment“ (BRIE) v podzemní laboratoři v Äspö v hydrogeologických podmínkách plánovaného HÚ. Hlavním úkolem experimentu a následně i simulovaných modelů je popis interakcí na rozhraní bentonitu a horniny za konstantní teploty a bez monitorování mechanických veličin. Zároveň poskytuje naměřená data vhodná k porovnání s výsledky simulací. Experiment BRIE a příslušné modely jsou podrobněji popsán v disertační práci.

Jako úvodní simulace je v disertační práci představen model laboratorního experimentu Water Uptake Test (kapitola 6.2), který doplňuje experiment BRIE a popisuje rovnoměrné sycení bentonitu na malém válcovém vzorku. Navazují další testovací simulace vztahující se přímo k in situ experimentu BRIE, kde je uvažován nehomogenní přítok vody. Tyto modely nejprve uvažují pouze hydrataci – sycení bentonitu v jednoduchých 1D a 2D osově symetrických geometriích (kapitoly 6.3 a 6.4 v disertační práci). Poté je použita složitější geometrie ve 3D se skutečnou polohou puklin umožňující přístup vody k bentonitu (kapitola 6.5 v disertační práci), výsledky tohoto modelu jsou prezentovány i v autoreferátu. Nakonec je přidán také vliv mechaniky – bobtnání bentonitu při jeho sycení (kapitola 6.6 v disertační práci).

Modely byly řešeny s různě vyjádřenými okrajovými podmínkami pro sycení bentonitu, které jednak simulují neomezený zdroj, jednak zdroj vody, jehož velikost závisí na stupni saturace. Jsou uvažovány modely v různých měřítkách, díky čemuž je možné proces saturace vystihnout z více úhlů pohledu a popsat hydrataci jak z lokálního, tak globálního hlediska.

Bentonit je v této práci saturován buď bodovým přítokem, nebo přítokem ve tvaru linie popisující průnik reálné pukliny s povrchem uvažovaného vrtu a v některých případech také celým rozhraním hornina-bentonit. Snažíme se popsat chování bentonitu při nehomogenní a nerovnoměrné hydrataci, která přináší další netriviální vlastnosti, jenž se ve výše uvedených jednodušších případech neprojeví (určení polohy přítoků, nejistoty parametrů okolního horninového prostředí atd.).

Dílicí zadání úloh (resp. jejich úvodních etap) jsou uvedeny v [3], kde jsou kromě toho prezentovány i úvodní výpočty (tzv. „scoping calculation“). Tyto simulace jsou provedené jednak v softwaru Code\_Bright v2.2 [25], jednak pomocí analytického řešení 1D lineární difuze, s kterými jsme v počátečních fázích výsledky modelů úspěšně porovnávali a pomocí nichž jsme prováděli kalibrace materiálových parametrů.

### 4.1.1 3D modely hydratace bentonitu

Kapitola se zabývá popisem a hodnocením chování bentonitové bariéry s nehomogenním přítokem vody z horniny způsobujícím nerovnoměrnou hydrataci v měřítku ukládacích vrtů experimentu BRIE v podzemní laboratoři v Äspö ve Švédsku.

V modelech je nejprve uvažována pouze saturace přítomnými puklinami – liniovými přítoky, jejichž polohy byly získány z geologického mapování, přičemž je zcela zanedbán přítok vody okolní horninou. V dalším kroku je do modelů přidán i vliv saturace prostřednictvím horninové matrice pomocí zjednodušené myšlenky více-škálových modelů, kde je přenesen vliv horniny z modelu ve větším měřítku do okrajové podmínky modelu v měřítku menším.

Takto zjednodušené modely nevystihují proces hydratace v plné šíři a podrobnosti, ale snaží se nalézt jednoduchou alternativu ke 3D modelům s okolní horninovou maticí. Mají i určitá omezení v popisu saturace, která budou vysvětlena níže, naproti tomu ale umožňují do modelu zahrnout i netriviální konfigurace puklin procházejících okolní horninou a ovlivňujících tok podzemní vody v okolí vrtu.

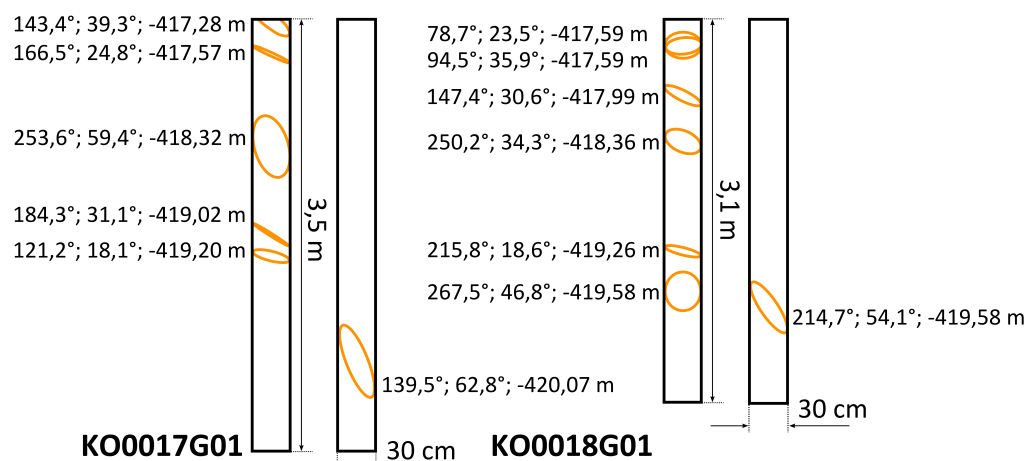
#### Hydratace bentonitu puklinami bez vlivu horniny

Proces hydratace bentonitu je simulován na 3D modelech vrtů KO0017G01 a KO0018G01 experimentu BRIE, přičemž uvažujeme pouze sycení prostřednictvím puklin procházejících okolní horninou (vliv horninové matrice není v této části zahrnut). Je zaveden předpoklad, že pukliny neustále dodávají vodu do vrtu, což reprezentuje předepsaná okrajová podmínka. Hydrataci řešíme ve dvou odlišných variantách buď s více puklinami (pět pro vrt KO0017G01, šest pro KO0018G01), nebo s jednou dominantní puklinou z hlediska dotace vody do vrtu.

Modely jsou řešeny na geometriích uvedených na Obr. 4.1 se znázorněnými polohami puklin. Vrt KO0017G01 je hluboký 3,5 m, vrt KO0018G01 3,1 m, poloměr obou je 15 cm. Pukliny procházející okolní horninou jsou zahrnuty už v geometrii a jsou vyjádřeny jako uzavřené křivky protínající vnější povrch vrtů – tyto linie budou respektovány i při konstrukci sítě a při zadávání okrajových podmínek.

V obou variantách modelů je uvažována počáteční saturace bentonitu  $S_l = 36 \%$ . Přísun vody do vrtu je simulován prostřednictvím puklin – na jejich průsečnicích s povrchem vrtů je předepsána plná saturace ( $S_l = 100 \%$ ). Množství vody, které je do vrtu transportováno, je ovlivněno pouze délkou průsečnice pukliny s povrchem vrtů. V popsaných variantách neuvažujeme hydrataci rozhraním hornina-bentonit (povrchem vrtů),

což odpovídá předepsanému nulovému toku na obou podstavách a vnějším plášti válce představujícím vrt.



Obr. 4.1: Geometrie vrtů KO0017G01 a KO0018G01 s vyznačenými polohami puklin a jejich geometrickou charakteristikou pro dvě varianty geometrie

Tab. 4.1: Rychlost saturace pro 3D modely vrtů v porovnání s 2D osově symetrickým modelem obsahujícím pouze bentonit, „3D 17“ označuje 3D model vrtu KO0017G01 a „3D 18“ 3D model vrtu KO0018G01

Model	$S_l = 50 \%$ Čas(rok)	$S_l = 75 \%$ Čas(rok)	$S_l = 92 \%$ Čas(rok)	$S_l = 95 \%$ Čas(rok)
2D (bez horniny)	22,5	50,0	85,0	97,5
3D 17 (5 puklin)	25,8	58,8	100,8	112,8
3D 18 (6 puklin)	7,5	16,9	29,2	33,0
3D 17 (1 puklina)	66,3	156,7	265,1	301,2
3D 18 (1 puklina)	50,1	115,7	194,4	222,2

U popsáných modelů hodnotíme rychlost a průběh nerovnoměrné hydratace bentonitu v závislosti na počtu a poloze puklin. Obecně platí, že vyšší saturace je dosaženo v místech, kde se nachází více puklin blízko sebe. Naopak pro části vrtů s úplnou absencí puklin je saturace velice pozvolná. Dále pak platí, že čím větším úhlem označovaným jako „dip“ (odklon od horizontální roviny) je puklina popsána, tím delší je průsečnice pukliny s povrchem vrtu a tím větší vliv má puklina na hydrataci bentonitu.

Vliv rozložení puklin je dobře vidět na časech dosažení konkrétních stupňů saturace, které uvádí Tab. 4.1 pro všechny řešené modely. Časem dosažení určitého stupně saturace označujeme ten časový krok, ve kterém je v celém objemu modelu dosaženo alespoň daného stupně nasycení. Modely s jednou puklinou se podle očekávání hydratují výrazně pomaleji než modely s více puklinami. Poměrně velké rozdíly jsou patrné i mezi oběma vrtů ve variantách s jednou nebo více puklinami.

Průběhy saturace můžeme také srovnat pomocí osových závislostí v různých časových krocích na Obr. 4.3. Na průbězích jsou patrná lokální maxima v místech, kde se nachází

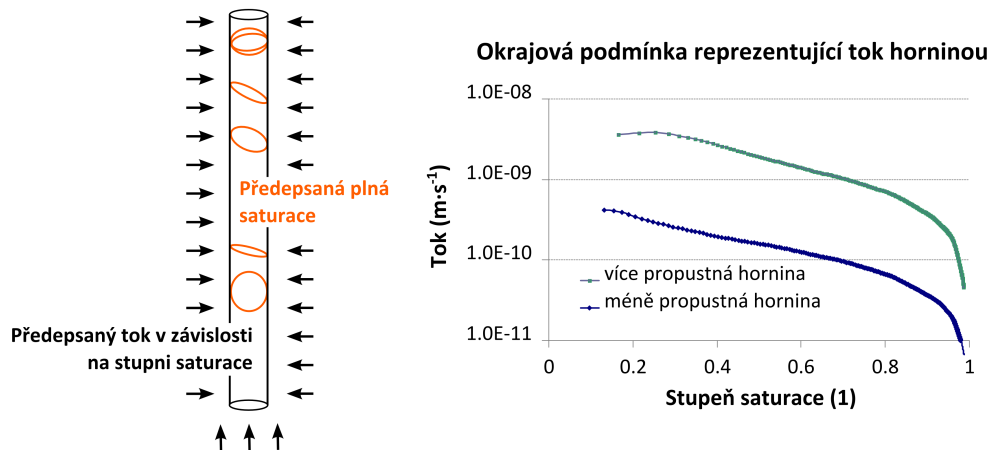
pukliny, přičemž dvě blízké pukliny mohou způsobovat výskyt pouze jednoho maxima. Šířka maxima v grafu je ovlivněna sklonem pukliny.

## Hydratace bentonitu puklinami a horninovou maticí

Modely v této kapitole rozšiřují výše představené simulace o vliv syčení prostřednictvím horniny. Jejich geometrie horninu fyzicky neobsahuje, ale přesto je v ní zahrnut její vliv pomocí okrajové podmínky, účinek puklin přitom zůstává shodný jako u modelů bez vlivu horniny. Jako v předchozí části modely řešíme ve variantách s jednou a s více puklinami pro oba uvažované vrty. Pro porovnání definujeme dvě verze okrajové podmínky reprezentující tok méně a více propustnou horninou.

Při definici modelů jsme vycházeli ze simulací popsanych v části 4.1.1, použitá geometrie je uvedena na Obr. 4.1, materiálové parametry v Tab. 3.1 a počáteční podmínka pro bentonit je  $S_l = 36\%$ . Změněny byly pouze okrajové podmínky – k Dirichletově okrajové podmínce na puklinách jsme přidali Newtonovu okrajovou podmínku, která reprezentuje hydrataci prostřednictvím horniny. Představuje závislost předepsaného toku na velikosti stupně saturace bentonitu a je nastavena na plášti vrtů a na dolní podstavě.

Tato okrajová podmínka je uvedena na Obr. 4.2 a byla odvozena z 2D osově symetrického modelu ve větším měřítku, (modely v kapitole 6.4.2 v disertační práci). Z osově symetrického modelu jsme získali závislost toku vody z horniny do bentonitu na stupni saturace, což odpovídá toku, kterým hornina přispívá k hydrataci bentonitu. Výsledná okrajová podmínka je uvedena na Obr. 4.2 pro dvě propustnosti horniny, varianty jsou označeny jako „Hornina 1“, kde byla okrajová podmínka odvozena z modelu s horninou o propustnosti  $k = 9,0 \cdot 10^{-22} \text{ m}^2$  a druhá jako „Hornina 2“ s nižší propustností horniny v 2D osově symetrickém modelu ( $k = 9,0 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2$ ).



Obr. 4.2: Schematické znázornění okrajových podmínek pro 3D modely s vlivem horniny (vlevo) a průběh okrajové podmínky reprezentující tok vody do bentonitu v závislosti na stupni saturace pro obě uvažované propustnosti horniny (vpravo)

Z výsledků simulací je zřejmé, že je vliv horniny na rychlost saturace v modelech poměrně výrazný. Proces syčení se zrychlil (většinou z řádu desítek až stovek let na stovky dní až jednotky roků podle okrajové podmínky). Tab. 4.2 shrnuje časy dosažení vybraných stupňů saturace pro modely 3D vrtů s vlivem horniny pro všechny řešené varianty

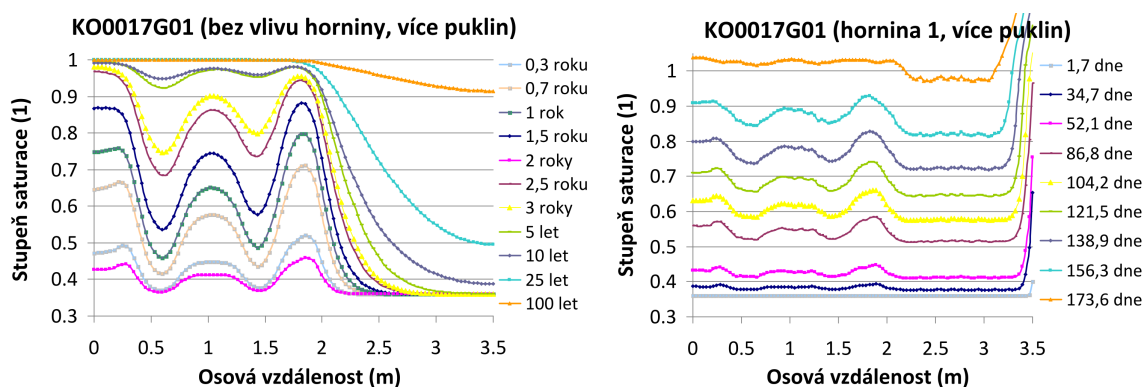
ve srovnání s 2D osově symetrickými modely s horninou. Rozdíly mezi modely s oběma okrajovými podmínkami simulujícími vliv horniny tolik výrazný není. Sycení 2D osově symetrických modelů je ve srovnání s 3D variantami pomalejší, i když obsahuje poměrně širokou puklinu.

V modelech díky Newtonově okrajové podmínce narážíme na určité nefyzikální chování – v pozdějších časových krocích přesáhne stupeň saturace v některých místech velikost 100 %. Model tento stav umožňuje díky způsobu definice okrajové podmínky, kde je sice definován výrazný pokles toku v plně hydratovaných místech, ale sycení pokračuje dál. V ideálním případě by platilo, že při plné saturaci, je předepsaný tok nulový, z grafu na Obr. 4.2 je však patrné, že se tok k nule pouze asymptoticky blíží, tudíž dovolí, aby nasycení přesáhlo 100 %.

## Vyhodnocení

Pro modely bez vlivu hydratace horninou jsme ukázali, jaký vliv má rozložení a počet puklin po délce vrtu. Z výsledků je zřejmé, že v závislosti na polohách puklin nelze zadání zjednodušit do osově symetrické úlohy, protože se vrty mnohdy saturují velice rozdílně. Pokud se v modelu nachází pouze jedna puklina, hydratace je velice pomalá (rozdíly oproti modelům s více puklinami činí i několik desítek let). Stejný vliv na časy dosažení konkrétních stupňů saturace hraje i rozložení puklin.

Modely s vlivem hydratace prostřednictvím horniny ukázaly, že se v globálním měřítku příliš neprojeví rozdílný počet a rozložení puklin. Hydratace se oproti modelům bez vlivu horniny výrazně zrychlila (většinou z řádu desítek až stovek let na stovky dní až jednotky roků) a rozložení stupně saturace se liší minimálně a hlavně okolo uvažovaných puklin. V tomto případě však musíme brát v úvahu, že byl pro popis hydratace vlivem horniny použito určité zjednodušení, které nedokáže plně vystihnout všechny aspekty procesu a v místech, kde byla dosažena plná saturace může docházet k nefyzikálnímu chování, které je vysvětlitelné použitou okrajovou podmínkou.



Obr. 4.3: Osově průběhy stupně saturace pro vrt KO0017G01 (varianta bez horniny a s horninou)

Tab. 4.2: Rychlost saturace pro 3D modely s 2D osově symetrickým modelem bentonitu s vlivem horniny, „3D 17“ označuje vrt KO0017G01 a „3D 18“ vrt KO0018G01, pro variantu „Hornina 1“ je čas uveden ve dnech, pro variantu „Hornina 2“ v letech

Varianta	Model	$S_l = 50 \%$	$S_l = 75 \%$	$S_l = 92 \%$	$S_l = 95 \%$
		Čas (den)	Čas (den)	Čas (den)	Čas (den)
Hornina 1	2D	104,0	272,0	552,0	656,0
	3D 17 (5 pukl.)	72,9	131,9	158,0	161,5
	3D 18 (6 pukl.)	78,1	135,4	159,7	163,2
	3D 17 (1 pukl.)	82,6	145,6	169,2	173,1
	3D 18 (1 pukl.)	82,6	145,6	169,2	173,1
		Čas (rok)	Čas (rok)	Čas (rok)	Čas (rok)
Hornina 2	2D	1,32	5,26	11,84	14,25
	3D 17 (5 pukl.)	0,66	2,09	3,03	3,20
	3D 18 (6 pukl.)	0,66	1,88	2,65	2,79
	3D 17 (1 pukl.)	0,95	2,40	3,35	3,50
	3D 18 (1 pukl.)	0,95	2,40	3,35	3,50

#### 4.1.2 3D sdružené HM modely

Sdružený hydro-mechanický (HM) model ve 3D popisuje proces bobtnání bentonitu při jeho hydrataci a částečně tím navazuje na modely sycení bentonitu v kapitole 4.1.1. Snažíme se vystihnout bobtnání bentonitu v závislosti na netriviální poloze pukliny v plné 3D geometrii, jenž vychází z reálných dat – model vrtu označeného jako KO001701 experimentu BRIE obklopený blokem horniny s propustnou puklinou, která byla v okolí vrtu detekována. Poloha a orientace pukliny způsobuje nehomogenní přítok do vrtu a nerovnoměrnou hydrataci bentonitu a následně také jeho bobtnání. Z hlediska mechaniky v modelu vyhodnocujeme změny napětí a deformaci v závislosti na změně objemu při bobtnání bentonitu.

Tento případ demonstruje řešení sdružené úlohy pomocí koncepce (kapitola 3) a navazuje na simulace hydratace bentonitu provedené v rámci disertační práce.

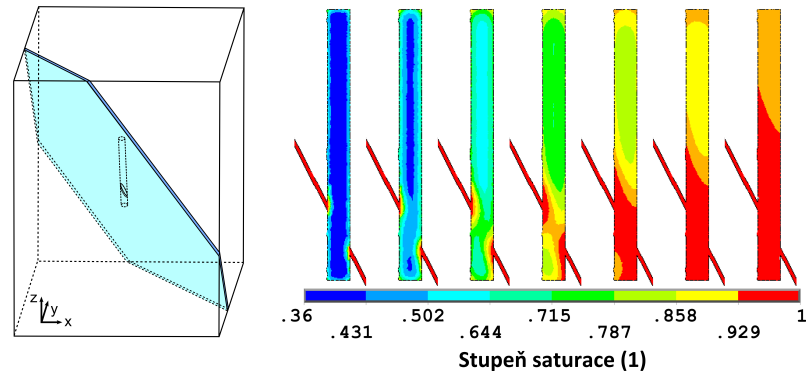
Model představuje blok horniny o rozměrech  $10 \times 10 \times 13,5$  m s vrtem ve tvaru válce s poloměrem podstavy 15 cm a výškou 3 m, který je vyplněný bentonitem, Obr. 4.4. Celou geometrii protíná puklina, kterou v modelu reprezentuje 3D kontinuum lišící se materiálovými vlastnostmi od horniny i bentonitu. Kvůli obecným konečně-prvkovým požadavkům na velikost a tvar elementů, byla puklina realizována s větším rozevřením, než je u reálných puklin takového rozsahu v žule obvyklé. Byly otestovány dvě různé tloušťky pukliny (5 cm a 10 cm).

Difuzivita všech materiálů je určena podle kapitoly 3.1 (použity jsou různé vztahy pro bentonit a pro horninu s puklinou s modifikovanými materiálovými parametry z Tab. 3.1). Mechanické materiálové vlastnosti jsou pro bentonit uvažovány podle Obr. 3.1 a Tab. 3.2 v závislosti na stupni nasycení. Horninová matrice je popsána konstantními mechanickými parametry, objemová roztažnost je nastavena na hodnotu  $10^{-10}$  (ANSYS nepřipustí ve výpočtu nulovou hodnotu). Materiál pukliny vychází z materiálového modelu pro horninu, liší se vyšší propustností a nižší normálovou tuhostí. Pro puklinu testujeme dva různé Youngovy moduly pružnosti:  $E_1 = 6 \cdot 10^9$  Pa (materiál označujeme jako „Puklina 1“) a  $E_2 = 6 \cdot 10^5$  Pa (materiál označujeme jako „Puklina 2“). První reprezentuje elastický



režim a druhý popisuje režim kluzu jako linearizaci elastické a plastické části v daném rozsahu. V kombinaci s dvěma různými tloušťkami pukliny tedy v simulacích řešíme čtyři různé situace.

Na všech okrajích horninové matrice a pukliny je předepsána okrajová podmínka plné saturace reprezentující neomezený zdroj vody. Předpokládáme, že hornina i puklina jsou na počátku procesu plně nasyceny, bentonit ve vrtu je saturován pouze částečně ( $S_l = 36\%$ ). Na okrajích domény v příslušném normálovém směru je předepsáno nulové posunutí, které dovoluje pohyb ve dvou zbývajících směrech a je nastaveno tak, aby bylo možné vyhodnotit změnu napětí vycházející ze změny objemu bentonitu při bobtnání.



Obr. 4.4: 3D geometrie HM modelu se znázorněním vrtu a pukliny (vlevo), průběh saturace bentonitu s puklinou znázorněný v čase 0,3 až 3,2 let v řezu vedeném osou vrtu a rovnoběžně s čelní stěnou modelu (vpravo, zobrazení horniny je vypnuto)

Tab. 4.3: Maximální (absolutní) hodnoty velikosti vektoru posunutí ( $u_{sum}$ ), první hlavní napětí a faktor intenzity napětí („Intenzita napětí“) pro tloušťku pukliny 5 cm

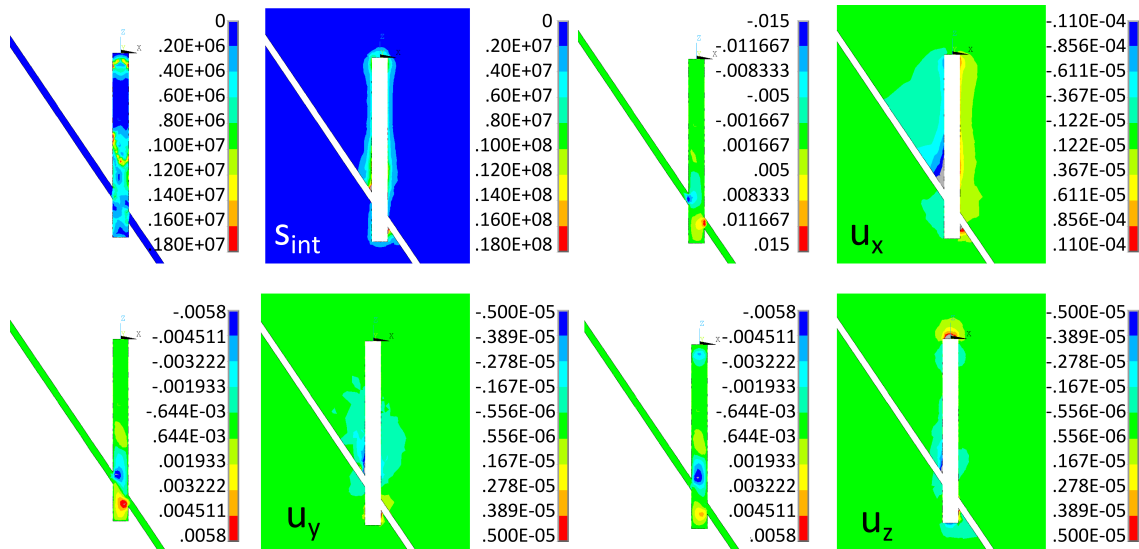
Materiál	Typ	$u_{sum}$ (m)	první hl.napětí (MPa)	Intenzita napětí (MPa)
Bentonit	Puklina 1	$6,42 \cdot 10^{-3}$	3,41	2,12
	Puklina 2	$1,34 \cdot 10^{-2}$	4,13	2,13
Hornina	Puklina 1	$2,26 \cdot 10^{-5}$	11,61	14,33
	Puklina 2	$1,15 \cdot 10^{-4}$	39,37	42,39

## Vyhodnocení

Cílem této kapitoly byla simulace sdruženého HM chování bentonitu ve vrtu obklopeném horninovou maticí s puklinou vedenou v netriviálním směru podle reálné geometrie experimentu BRIE. Obecná poloha pukliny způsobuje nehomogenní a nerovnoměrnou hydrataci bentonitu a následně jeho nerovnoměrné bobtnání, které ovlivňuje napjatost horniny. Simulací navazujeme na úlohy nehomogenní hydratace, jejichž detailní popis je uveden

v kapitole 4.1.1 a byl publikován v [36]. Ukázali jsme, že tento relativně složitý a výpočetně náročný problém je možné řešit pomocí nelineární elasticity spolu s difuzní rovnicí s nelineární difuzivitou, ale je nutné uvažovat všechna omezení, která přináší.

Z hydraulických výsledků modelů je patrné, že šířka pukliny (ve variantách 5 cm a 10 cm) v řešeném rozlišení časových kroků neovlivňuje hydrataci bentonitu v takové míře, aby se to projevilo na časech dosažení vybraných stupňů saturace – pro oba případy je bentonit z velké části hydratovaný za 3 roky. Mechanické výsledky potvrzují nerovnoměrné bobtnání bentonitu jako následek hydratace, které je nejvýraznější v okolí zdroje vody – pukliny. Nejvyšší posunutí v bentonitu činí asi 1 až 2 cm, v hornině desetiný až setiny mm.



Obr. 4.5: Intenzita napětí ( $s_{int}$ ) a složky vektoru posunutí  $u_x$ ,  $u_y$  a  $u_z$ , části modelu jsou zobrazeny v řezu a zvláště pro horninu a pro bentonit s puklinou (varianta „Puklina 2“ o šířce pukliny 10 cm)

## 4.2 Modelování hydratace bentonitu podle experimentu Prototype Repository

V druhé části se pomocí analogického postupu, snažíme vystihnout chování bentonitu v sérii modelů vycházejících z dalšího in situ experimentu „Prototype Repository“ (PR). Jeho stručný popis je uveden v kapitole 7.1 disertační práce spolu s informacemi o měřených datech, která jsme využili při definici modelů nebo k porovnání výsledků. Modelům hydratace předcházela řada simulací provedených spolupracovníky autorky (vedení tepla, proudění vody v nasyceném prostředí, viz [55] a [53]).

### 4.2.1 Modely hydratace bentonitu ve vrtech DA3551G01 a DA3545G01

Modely experimentu PR simulují hydrataci bentonitu ve vrtech DA3551G01 a DA3545G01. V případě PR máme k dispozici více naměřených dat – pro definici modelu data z období před instalací experimentu, pro jeho vyhodnocení a pro porovnání data po jeho rozebrání. Hydrataci bentonitu simulujeme v řadě variant modelů, které budou popsány níže.

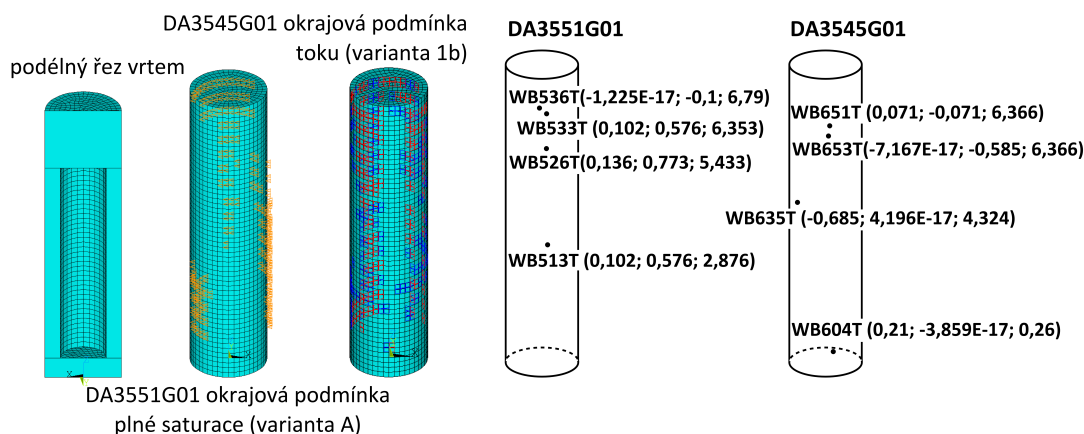
V modelech uvažujeme vrty v geometrii, která je plánována pro použití v reálném HÚ: oba modely mají hloubku 8 m a průměr 1,75 m a jsou vyplněné bentonitem s prázdným prostorem místo kanystru. Kanystr je v experimentu nahrazen topidlem, ale do modelu jej nebylo nutné zahrnovat. Válcové bloky a prstence bentonitu umístěné nad, pod a okolo kanystru jsou v modelech nahrazeny homogenním materiálovým prostředím. Okolní hornina není v modelech uvažována, její vliv se snažíme vystihnout pomocí okrajových podmínek.

Konečně-prvkové sítě pro oba vrty byly definovány tak, aby na jejich povrch bylo možné snadno předepsat okrajovou podmínku prostorově rozloženou podle změřených dat z mřížky podle testu popsaného v disertační práci (mají tvar šestistěnu Obr. 4.6). Počáteční podmínka odpovídá rozložení stupně saturace v bentonitu na počátku experimentu: v horní a dolní části je bentonit saturován na 77,8 % a ve střední části na 84,1 %. Je použit shodný materiálový model jako u experimentu BRIE, protože nebyl v zadání [23] konkrétně specifikován. Difuzivita je zadána podle kapitoly 3.1 s dosazenými hodnotami materiálových parametrů podle Tab. 3.1.

#### Varianty okrajových podmínek

Okrajové podmínky jsou aplikovány pomocí tzv. duální sítě, jejíž princip je popsán v disertační práci. Pozice, na které se okrajové podmínky předepisují vychází z jednoho z experimentů, kde byl měřen přítok pomocí savého materiálu rozmístěného v mřížce na vnitřním povrchu vrtu. Řešíme dva základní případy (s řadou konkrétních variant) lišící se předepsanými okrajovými podmínkami.

- **Předepsaná okrajová podmínka plné saturace:** v místech, kde byl detekován přítok do vrtu pomocí experimentů, předepíšeme Dirichletovu okrajovou podmínku  $S_l = 100 \%$  (neomezený zdroj vody)
- **Předepsaná konstantní hodnota toku:** předepisujeme okrajovou podmínku druhého druhu – konkrétní hodnotu toku, kterou jsme odvodili z dalších měření přítoků do vrtů (bližší specifikace v disertační práci).



Obr. 4.6: Výpočetní síť pro vrty experimentu Prototype Repository se zobrazením okrajových podmínek u dvou vybraných variant a pozice senzorů, kde byly vyhodnocovány průběhy různých veličin

Modely s okrajovou podmínkou plné saturace simulujeme ve variantách A a B, které se liší pozicí předepsané okrajové podmínky:

- **varianta A:** předepsaná podmínka  $S_l = 100 \%$  na místech, kde byl detekován přítok do vrtu v testech se savým materiálem,
- **varianta B:** okrajová podmínka  $S_l = 100 \%$  je předepsaná na čtverečky mřížky, které odpovídají pozicím puklin.

Modely s okrajovou podmínkou předepsaného toku uvažujeme ve variantách 1a, 1b, 1c a 2a, 2b a 2c, kde číslo označuje měření, z něhož byla hodnota toku odvozena a písmeno určuje místa, kam se okrajová podmínka předepíše.

- **měření 1:** označuje hodnoty celkových přítoků do jednotlivých vrtů,
- **měření 2:** označuje hodnoty přítoků do vrtů jednotlivými puklinami.

Modely obou vrtů s okrajovou podmínkou předepsaného toku jsme řešili ve třech variantách, přičemž okrajovou podmínku je nutné do softwaru ANSYS zadat ve tvaru hodnoty toku na  $m^2$ , který je rozlišen podle toho, kam se hodnoty předepisují:

- **varianta a:** popisuje případ, kdy uvažujeme naměřenou hodnotu přítoku do celého vrtu, kterou rozpočítáme do jednotlivých čtverečků podle mřížky experimentu se savým materiálem, přičemž nerozlišujeme intenzitu toku,
- **varianta b:** představuje případ, kdy naměřený přítok do vrtu rozpočítáme do čtverečků stejně jako ve variantě a, ale bereme v úvahu dvě velikosti toků,
- **varianta c:** odpovídá variantě a, přičemž celkový přítok rozpočítáváme pouze na ty čtverečky, které souhlasí s polohami propustných puklin (tento případ je analogický k variantě A).

## Výsledky pro jednotlivé varianty

Podobně jako u simulací experimentu BRIE vyhodnocujeme rychlost a průběh hydratace obou uvažovaných vrtů v závislosti na aplikovaných okrajových podmínkách. Sledujeme saturaci vrtu ve dvou podélných, vzájemně kolmých řezech v čase 8 let a ve stejném časovém kroku i příčně vedené řezy každým z bloků a prstenců v polovině jejich výšky.

Výsledky modelů také porovnáваме s experimentálními daty (měřenými daty ze senzorů v bentonitu). Srovnáváme příčné řezy každým z bloků/prstenců, na kterých jsou znázorněna rozložení stupně saturace. Pro porovnání využíváme také změřené průběhy relativní vlhkosti v definovaných pozicích senzorů, které je však nejprve třeba získat převedením ze stupně saturace.

## Výsledky pro modely s okrajovou podmínkou plné saturace

Už z map získaných z měření uvedených v disertační práci je patrné, že se polohy propustných puklin a polohy detekovaného přítoku v experimentech s absorpčním materiálem příliš neshodují, tudíž se nemohou shodovat ani varianty A a B. Model DA3551G01 se ve variantě B po 8 letech nestihl příliš hydratovat, model ve variantě A pouze částečně ve střední části. Tyto rozdíly jsou dány odlišně velkou plochou, na kterou je okrajová podmínka předepsána (rozdíl je téměř desetinásobný). Ještě větší odlišnosti vykazují modely vrtu DA3545G01, kde je rozdíl ploch téměř pětadvacetinásobný. Ve variantě A je model ve velké míře saturovaný s výjimkou dolní části, ve variantě B je naopak dolní část díky polohám puklin hydratovaná nejvíce.

Na Obr. 4.7 jsou dále uvedeny příčné řezy vedené v polovině výšky vybraných bloků nebo prstenců bentonitu spolu s obrázky získanými z naměřených dat. Ve vybraných příčných řezech se lépe shodují modely vrtů ve variantě A, je u nich vidět kvalitativně, v některých případech i kvantitativně podobné rozložení nasycení. Saturace modelů ve variantě B opět potvrzuje podhodnocení simulovaných výsledků oproti naměřeným datům.

## Výsledky pro modely s okrajovou podmínkou konstantního toku

Na rozdíl od předchozích případů modely s předepsanou okrajovou podmínkou ve tvaru hodnoty toku vykazují vyšší nasycení v celém objemu vrtu. Díky nastavení modelu (okrajové podmínky) není sycení omezeno hodnotou 100 % a obzvláště v místech, kde byla okrajová podmínka předepsána jsou jeho hodnoty vyšší. Je tedy nutné tuto odlišnost uvažovat při vyhodnocování výsledků.

V příčných řezech je také patrný vyšší stupeň saturace oproti naměřeným hodnotám i modelům s okrajovou podmínkou plné saturace. Rozložení stupně saturace v modelech nejlépe odpovídá naměřeným hodnotám ve variantách 2a a 2b u vrtu DA3551G01 a ve variantě 1c pro vrt DA3545G01. Varianty 1a a 1b jsou v porovnání s naměřenou hydratací saturovány výrazněji. Podrobnější popis výsledků a jejich porovnání s měřenými daty jsou uvedeny v disertační práci.

## Porovnání časových průběhů relativní vlhkosti

V materiálech k experimentu Prototype Repository bylo specifikováno umístění senzorů relativní vlhkosti. Ve vybraných pozicích uvedených na Obr. 4.6 porovnáваме výsledky modelů s naměřenými časovými průběhy. Protože je v řídicích rovnicích modelových příkladů stavovou proměnnou stupeň saturace, bylo jej nutné nejprve pomocí postupu

uvedeného v disertační práci převést na relativní vlhkost. Průběhy relativní vlhkosti byly porovnány pouze pro modely ve variantě A, protože zde nejlépe odpovídá rozložení a z části míra nasycení bentonitu naměřeným datům.

Při prvním porovnání průběhy relativní vlhkosti z varianty A příliš neodpovídaly naměřeným závislostem. Výrazné rozdíly byly už v počátečních hodnotách stupně saturace, které byly výrazně vyšší než předepsaná počáteční podmínka. Proto byla pro bentonit otestována van Genuchten retenční křivka s odlišnými parametry ( $P_0 = 37,273$  MPa a  $\lambda = 0,2$ ) podle [22], kde byla uvažována obdobná hodnota počátečního stupně saturace jako v experimentu Prototype Repository. V modelech s uvažovanou retenční křivkou s novými parametry bylo lokálně (ve vybraných pozicích sensorů) dosaženo mnohem lepší shody než pro původní parametry převzaté z definice modelů experimentu BRIE, viz Obr. 4.8. Při zpětném porovnání stupně saturace pro modely s nově uvažovanou retenční křivkou se však ukázalo, že i když simulované průběhy relativní vlhkosti ve vybraných bodech lépe odpovídají naměřeným závislostem, globálně jsou oba vrty mnohem více nasyceny.

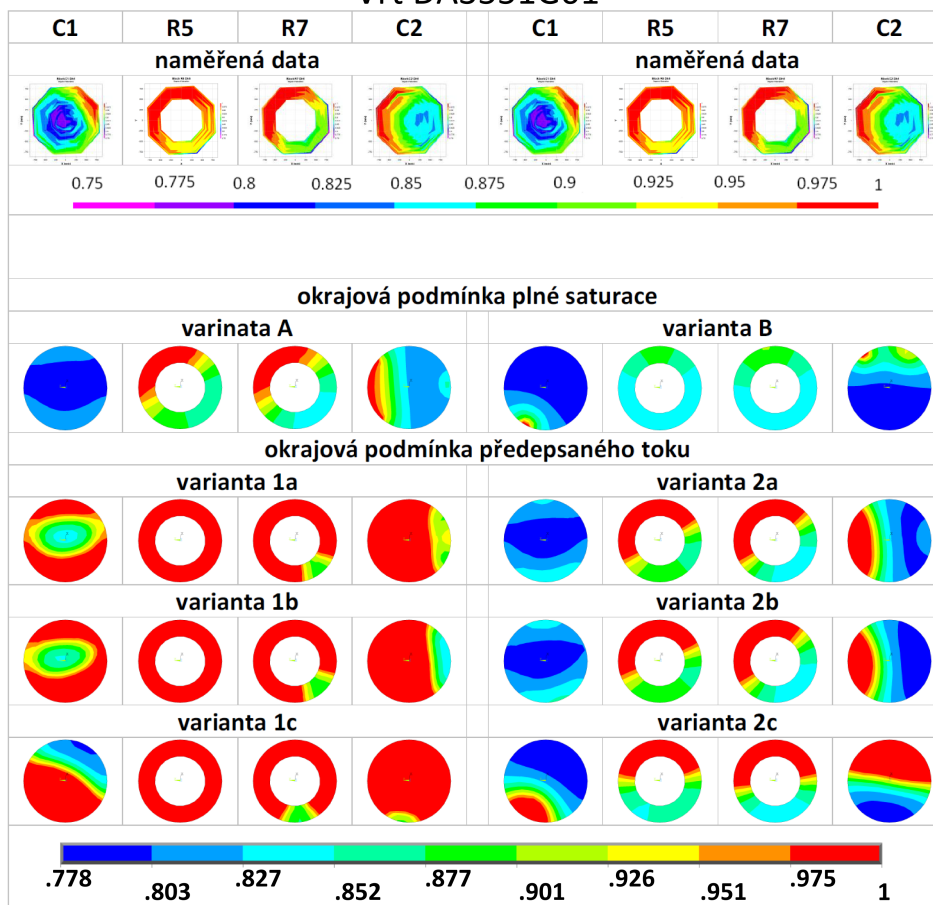
## Vyhodnocení

V modelech experimentu Prototype Repository jsme vyhodnocovali hydrataci bentonitu ve dvou vrtech se shodnou geometrií lišící se rozložením přítoků. Bylo zde využito několik in situ měření, ať už k definici modelu, ale také k porovnání s výstupními daty.

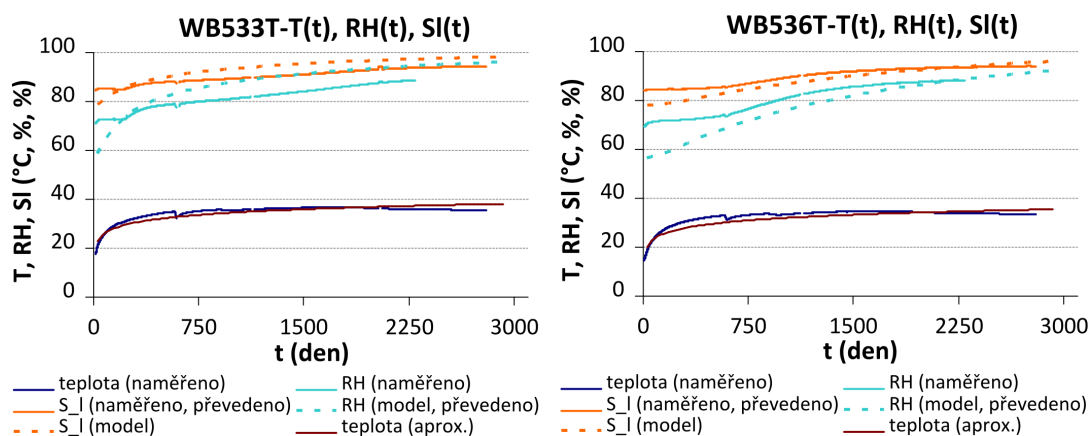
První varianta s okrajovou podmínkou plné saturace kvantitativně a kvalitativně nejlépe odpovídá rozložení stupně saturace v jednotlivých řezech ve sledovaném čase 8 let. Při lokálním porovnání průběhů relativní vlhkosti však nedochází k výrazné shodě (dokonce ani v počátečních hodnotách stupně saturace). Proto byly modely přepočítány pro rozdílné parametry retenční křivky převzaté z modelů k experimentu „Canister Retrieval Test“ [22] s obdobně definovanými počátečními stupni saturace v bentonitu. V tomto případě lokální průběhy stupně saturace/relativní vlhkosti odpovídají lépe.

Druhá varianta – modely s okrajovou podmínkou toku umožňují regulovat přítok vody do bentonitu, ale díky konstantní hodnotě toku je zde možné překročit 100% saturaci, k čemuž dochází v pozdějších časových krocích v okolí míst, kde byla okrajová podmínka předepsána. Celkově tyto varianty vykazují vyšší nasycení (oproti měřeným datům i modelům s okrajovou podmínkou plné saturace), ale v některých případech je také dosaženo poměrně dobré shody.

### Vrt DA3551G01



Obr. 4.7: Zobrazení stupně saturace ve vybraných příčných řezech v různých variantách modelů vrtu DA3551G01 v čase  $2,5 \cdot 10^8$  s



Obr. 4.8: Průběhy relativní vlhkosti a stupně saturace v pozicích senzorů označených: WB533T a WB536T, porovnání model vs. měření pro vrt DA3551G01

## Závěr

Disertační práce popisuje a zhodnocuje možnosti využití numerických simulací pro výzkum procesu saturace bentonitové bariéry v rámci hlubinného úložiště. Oproti podobně zaměřeným pracím se soustředí na nehomogenní přítok podzemní vody z horniny a tím i na nerovnoměrné podmínky syčení bentonitu.

Simulace navazují na probíhající výzkum v rámci mezinárodního projektu „Task Force on Engineered Barrier Systems“ (TF EBS), konkrétně na dva rozsáhlé terénní experimenty: „Bentonite Rock Interaction Experiment“ (BRIE) a „Prototype Repository“. Společnou vlastností obou experimentů jsou podmínky s nehomogenním přítokem podzemní vody. Odlišují se např. v měřítku (rozměrech vrtů), měřených datech a v neposlední řadě i způsobu měření přítoků a v průběhu experimentu. Prototype Repository se snaží vystihnout chování hlubinného úložiště jako celku, BRIE se naopak zaměřuje na detailní analýzu procesů na rozhraní bentonit-hornina.

V simulacích byla využita méně obvyklá koncepce podle [4] pro popis proudění v částečně saturovaném prostředí, ve které je běžně zavedená Richardsova rovnice vyjádřena pomocí difuzní rovnice s nelineární difuzivitou. Modely prezentované v disertační práci ukázaly, že je pomocí této koncepce možné simulovat hydrataci bentonitu bez větších omezení. Jeho hlavní výhodou je, že model lze snadno definovat v běžně dostupných simulačních nástrojích a není tedy třeba specializovaný kód. Simulace byly úspěšně realizovány ve výpočetním nástroji ANSYS včetně řešení sdruženého hydro-mechanického problému.

V první fázi byla použitelnost koncepce úspěšně ověřena na jednodušších modelech popsaných v kapitolách 6.3 a 6.4 v disertační práci. Kalibrací na referenční výpočet [3] byl v rámci těchto simulací rovněž upřesněn materiálový model – konkrétní parametry propustnosti pro bentonit a horninovou matici. K výraznější změně došlo pouze u hodnoty propustnosti horniny, kde se všeobecně předpokládají nehomogenní a nejisté podmínky.

Aplikovatelnost takto definované koncepce byla dále potvrzena na složitějších simulacích navazujících na terénní experimenty (BRIE a PR) v kapitolách 6 a 7 disertační práce, které vystihují proces hydratace bentonitu ve vrtech pomocí 3D modelů různě složitě geometrie. Klíčovými jsou ale definované okrajové podmínky, které vystihují v odlišných formách jednak nehomogenní přítoky do vrtů prostřednictvím puklin, jednak rovnoměrně distribuovaný přítok pomocí okolní horninové matrice. Tímto způsobem lze poměrně snadno vyřešit modely, které jsou komplikované (obzvláště díky jednodušší realizaci geometrie obsahující větší množství puklin v horninové matici).

Bylo provedeno také posouzení vlivu propustnosti okolní horniny na syčení bentonitu. Na základě provedených simulací lze říci, že vliv horniny na hydrataci bentonitu může být v určitém rozsahu propustností výrazný. Úlohy definované v rámci disertační práce jsou na propustnost horniny poměrně citlivé – při změně parametrů horniny se řádově změní i rychlost hydratace, z čehož vyplývá nutnost uvažovat tuto nejistotu i při plánování hlubinného úložiště.



Rychlost sycení může být zároveň ovlivněna přítomností puklin v horninové matici a hlavně jejich počtem a distribucí podél vrtu. Těmito vlastnostmi se konkrétně zabývají modely v kapitole 4.1.1, ve kterých je patrné výrazné zrychlení hydratace při vyšším počtu puklin (zrychlení dosažení plné saturace ze stovek let na desítky let u modelů bez vlivu horniny s jednou puklinou vs. s více puklinami). Popsán je i vliv rozložení puklin podél vrtu, který u daných modelů způsobil více než trojnásobný rozdíl v rychlosti sycení.

V rámci disertační práce byla také řešena sdružená hydro-mechanická úloha, jejíž definice vychází z postupu [5] a [19] s využitím nelineárního elastického materiálu a bobtnáním reprezentovaným objemovou roztažností závislou na stupni saturace. Simulace potvrdily možnost využití této koncepce i pro úlohu s netriviální geometrií obsahující puklinu, která způsobuje nerovnoměrné sycení bentonitu (výsledky ukazují, že posunutí dosáhlo v bentonitu v takto definovaných modelech maximálně jednotek cm).

V modelech souvisejících s laboratorními i terénními experimenty bylo využito velké množství měřených dat, která byla uvažována při definici modelů, ale i při porovnání s výsledky simulací. V mnohých případech modely sloužily také ke zpětné analýze experimentálních dat a vysvětlení některých nejistot.

Popsané modely hydratace bentonitu nabízí možnost dalších analýz a navazujících simulací. Zajímavým směrem jsou sdružené procesy (jak hydro-mechanické, tak i sycení ve sdružení s teplotou), které díky vzájemnému ovlivnění kladou vyšší nároky jak na přesnost definice modelu, tak i na výpočetní techniku. Jednou z možností mohou být simulace sdružených procesů v Prototype Repository, kde jsou k dispozici nejen hydraulická data, ale také informace o teplotě a mechanických veličinách a sdružený model by mohl přispět k zpřesnění simulovaných výsledků. Sdružené modely jsou rovněž vhodné k detailnějšímu porovnání se simulacemi s využitím sofistikovanějších modelů pro popis bobtnání.

Další možností pokračování jsou simulace terénních experimentů ve složitějších geometriích s obsaženou horninou, které by byly vhodné k porovnání a zpřesnění simulací uvedených v disertační práci.

V disertační práci jsou na základě numerických simulací popsány některé poznatky, které mohou přispět k plánování hlubinného úložiště. Zároveň jsou zde uvedeny zjištěné doplňující informace o simulovaných jevech, nebo funkčnosti použitých metod. Práce je tedy významným krokem k tomu, aby bylo možné přesněji predikovat průběh sycení bentonitu v hlubinném úložišti v rámci analýzy bezpečnosti, na základě znalostí hydraulických podmínek v hornině z předchozího průzkumu. Zároveň ukazuje možné větší nejistoty v nasycení, které je nutno zohlednit při predikci dalších jevů (tepelná analýza, homogenizace).

## Přínosy disertační práce

Přínosy disertační práce můžeme rozdělit do dvou oblastí, které spolu vzájemně souvisejí. První se týká využití metodiky a druhá práce s daty (porozumění simulovaným procesům, práce s experimenty, analýza simulovaných a měřených dat). Přínosy budou tímto způsobem popsány i v následujících bodech.

- Využití nových postupů ve formulaci a řešení modelů sycení bentonitu
  - ověření funkčnosti modelů na konkrétních datech,
  - vylepšení popisu – zahrnutí netriviálních vlastností (nelinearita difuzivity a okrajové podmínky),
  - demonstrace využití koncepce na komplexnějších úlohách (např. více-škálový model – přenos okrajové podmínky),
  - vyhodnocení citlivosti modelovaných procesů – analýza vlivu nehomogenity hydraulických vlastností (počet a umístění puklin, propustnost horninové matrice) na rychlost a průběh saturace, které slouží jako podklad (upřesnění) pro scénáře v rámci posouzení bezpečnosti úložiště).
- Interpretace dat z in situ experimentů v interakci se zahraničními týmy
  - prokázání, že zachycená skutečnost v simulacích probíhá podle představy fungování modelu,
  - zjištění a částečně i vysvětlení nepřesností v měřených datech a zkreslujících vlivů na měření,
  - interpretace průběhu hydratace bentonitu, ve vztahu ke konkrétním podmínkám (přesně specifikované pukliny a horninová matrice).

## Literatura

- [1] Alonso, E., Gens, A., and Josa, A.: A Constitutive Model for Partially Saturated Soils. *Géotechnique* **40** (1990), 405–430.
- [2] AMEC: ConnectFlow – Groundwater Modelling Software. <http://www.connectflow.co.uk>. Online, cit. 2015-06-11.
- [3] Bockgård, N., Vidstrand, P., and Åkesson, M.: Task 8 Modelling the Interaction between Engineered and Natural Barriers – An assessment of a Fractured Bedrock Description in the Wetting Process of Bentonite at Deposition Tunnel Scale. Technická zpráva, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2010.
- [4] Börgesson, L.: Water Flow and Swelling Pressure in Non-Saturated Bentonite-Based Clay Barriers. *Eng Geol* **21** (1985), 229–237.
- [5] Börgesson, L., Chijimatsu, M., Fujita, T., Nguyen, T., and Jing, L.: Thermo-Hydro-Mechanical Characterisation of a Bentonite-based Buffer Material by Laboratory Tests and Numerical Back Analysis. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences* **38** (2001), 95–104.
- [6] Börgesson, L. and Hernelind, J.: Consequences of Loss or Missing Bentonite in a Deposition Hole – A Theoretical Study. Technická zpráva SKB TR-06-13, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2006.
- [7] Březina, J., Stebel, J., Flanderka, D., and Exner, P.: *FLOW123D version 1.8.2, Documentation of File Formats and Brief User Manual*. Technická univerzita v Liberci, Liberec, 2015. <http://flow123d.github.io/>, online, cit. 2015-06-11.
- [8] Chalmers University of Technology: Bentonite Rock Interaction Experiment. <http://www.chalmers.se/en/projects/Pages/brie.aspx>. Online, cit. 2015-06-28.
- [9] Chen, G. J. and Ledesma, A.: Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Modeling of the Full-Scale in Situ Test „Prototype Repository“. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering* **135** (2009), 121–132.
- [10] CIMNE: DEMpack Software. <http://www.cimne.com/dem/>. Online, cit. 2015-06-10.
- [11] Císlerová, M. and Vogel, T.: *Transportní procesy ve vadózní zóně*. Fakulta stavební, ČVUT, Praha, 2008.
- [12] Cundall, P.A. and Strack, O.D.L.: A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies. *Géotechnique* **29** (1979), 47–65.

- [13] Diersch, J.: *FEFLOW Finite Element Subsurface Flow and Transport Simulation System*. DHI-WASY, Berlin, Germany, 1 edn., 2012.
- [14] Exner, P.: *Metody rozkladu jednotky pro aproximaci bodových zdrojů vody v porézním prostředí*. Diplomová práce, Technická univerzita v Liberci, 2013.
- [15] Fries, T.P. and Belytschko, T.: The Extended/Generalized Finite Element Method: An Overview of the Method and its Applications. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **84.3** (2010), 253–304.
- [16] Frydrych, D.: ISERIT – Výpočetní systém pro transport tepla a vlhkosti ve formě páry a imobilní vody. <https://emporium.nti.tul.cz/DF2EM/apps/ISERIT/index.html>. Online, cit. 2015-08-04.
- [17] Goodman, R.E.: *Methods of Geological Engineering in Discontinuous Rocks*. West Publishing Company, San Francisco, CA, 1976.
- [18] Hokr, M., Novák, J., and Maryška, J.: Výzkum procesů pole blízkých interakcí hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů, Oblast 4: studium THMC procesů probíhajících v úložišti. Technická zpráva Artec TUL, Technická univerzita v Liberci, 2007.
- [19] Jing, L. and Nguyen, T.S.: Implications of Thermal-Hydro-Mechanical Coupling on the Near-Field Safety of a Nuclear Waste Repository. Technická zpráva BMT1A/WP2, SKI report 2005:24, DECOVALEX III/ BENCHPAR Projects, 2005.
- [20] Jing, L. and Stephansson, O.: *Fundamentals of Discrete Element Methods for Rock Engineering: Theory and Applications*. Elsevier, Amsterdam, 2007.
- [21] Johannesson, L.E.: Prototype Repository – Measurements of Water Content and Density of the Retrieved Buffer Material from Deposition Hole 5 and 6 and the Backfill in the Outer Section of the Prototype Repository. Technická zpráva SKB P-13-14, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2014.
- [22] Kristensson, O. and Börgesson, L.: Canister Retrieval Test – Final Report. Technická zpráva SKB TR-14-19, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2015.
- [23] Kristensson, O. and Johannesson, L.E.: Description of the Prototype Repository Test compiled for EBS Task Force. Technická zpráva, Clay Technology AB, Lund, Sweden, 2010.
- [24] Kröhn, K.P.: New Conceptual Models for the Resaturation of Bentonite. *Applied Clay Science* **23** (2003), 25–33. Clay Microstructure. Proceedings of a Workshop held in Lund, Sweden, 15–17 October 2002.
- [25] Olivella S. et al.: Numerical Formulation for a Simulator (Code\_Bright) for the Coupled Analysis of Saline Media. *Engineering Computations* **13** (1996), 87–112.
- [26] Pedroso, D. M. and Farias, M. M.: Extended Barcelona Basic Model for Unsaturated Soils under Cyclic Loadings. *Computers and Geotechnics* **38** (2011), 731–740.
- [27] Richards, L.A.: Capillary Conduction of Liquids through Porous Mediums. *Physics* **1** (1931), 318–333.

- [28] Roscoe, K.H. and Burland, J.B.: On The Generalised Stress-Strain Behaviour of 'Wet' Clay. *Eng. plasticity* **1** (1968), 535–609.
- [29] Schanz, T., Nguyen, T., L., and Datcheva, M.: Thermo-Hydro Mechanical Column Experiment to Study Expansive Soil Behaviour. *Multiphysical Testing of Soils and Shales*. Springer Berlin Heidelberg (2013), 125–130.
- [30] Svoboda, J.: The Experimental Study of Bentonite Swelling into Fissures. *Clay Minerals* **48** (2013), 383–389.
- [31] Vilks, P., Miller, N.H and Stanchell, F.W.: Laboratory Program Supporting SKB's Long Term Diffusion Experiment. *Technická zpráva 06819-REP-01300-10111-R00*, Atomic Energy of Canada Limited, Canada, 2005.
- [32] Štáštka, J.: Mock-up Josef Demonstration Experiment. *Tunel* **23** (2014), 65–73.
- [33] Zienkiewicz, O., Taylor, R., and Zhu, J.: *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. Butterworth-Heinemann, Oxford, 2013, seventh edn.

## Seznam publikací autorky

### Recenzované příspěvky

- [34] Škarydová, I., Hokr, M., Solution of Mechanical Problems in Fractured Rock with the User-defined Interface of COMSOL Multiphysics., In *Proceedings of Seminar – Programs and Algorithms of Numerical Mathematics 17*. 1. vyd. Praha: Matematický ústav AV ČR, v.v.i, pp. 200–206. ISBN 978-80-85823-64-6 (2015)
- [35] Hokr, M., Škarydová, I., Frydrych, D., Modelling of Tunnel Inflow with Combination of Discrete Fractures and Continuum, *Computing and Visualization in Science*, Vol. 15, pp. 21–28 (2013)
- [36] Škarydová, I., Hokr, M., Modeling of Bentonite Hydration Using Nonlinear Diffusion Model, *Mathematical Models in Engineering & Computer Science*, NAUN, pp. 124–129, ISBN: 978-1-61804-194-4 (2013)

### Konferenční příspěvky

- [37] Škarydová, I., Hokr, M., Model of Bentonite Swelling Solved as a Contact Problem, *Proceedings of International Conference on the Performance of Engineered Barriers: Backfill, Plugs & Seals*, Federal Institute for Geosciences and Natural Resources (BGR), Germany, pp. 297–301 (2014)
- [38] Škarydová, I., Hokr, Modeling of Bentonite Hydration Process in a High Level Waste Repository, *COMSOL conference 2013*, Rotterdam, Netherlands (2013)

- [39] Škarydová, I., Hokr, M., Modeling of Bentonite Hydration from Fractured Rock Based on the Field Experiment, The Fifth International Conference on Porous Media and Annual Meeting of the International Society for Porous Media – InterPore 2013, Prague, Czech Republic (2013)
- [40] Škarydová, I., Hokr, M., Local Inflow to Bentonite – Solution with Simple Diffusion/Swelling Model, International meeting "Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement 2012", Montpellier, France, book of abstracts, pp. 692–693 (2012)
- [41] Škarydová, I., Hokr, M., Examples of Groundwater Problems with Discrete Features and Singularities, International Conference on Extended Finite Element Methods – XFEM 2011, Cardiff, United Kingdom, book of abstracts, pp. 125 (2011)
- [42] Škarydová, I., Hokr, M., Comparison of Different Numerical Solutions of Groundwater Inflow into a Tunnel, Mathematical Modelling and Analysis – MMA 2011, Sigulda, Latvia, book of abstracts, pp. 121 (2011)
- [43] Balvín, A., Hokr, M., Škarydová, I., Flow and Transport Modelling Based on Tunnel Water Inflow Observations, ModelCARE 2011 Repositories of Knowledge in ModelCare book of abstracts, pp. 148 (2011)
- [44] Škarydová, I., Hokr, M., Modelování podzemního proudění jako sdružené úlohy v 3D-2D-1D geometrii se složitou diskretizací, In: Seminář numerické analýzy 2010, sborník z konference, Ústav informatiky AV ČR, v.v.i., 2010, pp. 135–137, ISBN 978-80-87136-07-2 (2010)
- [45] Škarydová, I., Hokr, M., Modelling of Tunnel Inflow with Coupled 3D Groundwater and 2D Surface Flow Concept, In: HydroPredict 2010, Prague, Czech Republic, Volume of abstracts, pp. 75–76 (2010)
- [46] Škarydová, I., Hokr, M., Výpočty sdružených úloh napjatosti a proudění pro rozpukanou horninu, Ph.D. Workshop 2009 proceedings, Institute of Geonics AS CR, Ostrava (2009)

### **Kapitola v monografii**

- [47] Balvín, A., Hokr, M., Škarydová, I. a Rálek, P. Tunnel Inflow in Granite – Fitting the Field Observations with Hybrid Model of Discrete Fractures and Continuum. Fractured Rock Hydrogeology. 1. vyd. London: CRC Press / Balkema, pp. 241 – 256. ISBN 9781138001596 (2014)

### **Výzkumné zprávy**

- [48] Uhlík a kol., Hydrogeologické modely horninového prostředí pro hlubinné úložiště – Rešerše zahraničních přístupů k modelování HÚ, metodika a koncepce řešení, technická zpráva, PROGEO, s.r.o., Roztoky, leden 2015. 138 str. (2015)

- [49] Březina, J., Škarydová, I., Softwarové nástroje pro studium teplotních a hydrogeologických procesů v horninovém prostředí, etapová zpráva za etapu E3.1 pro projekt GeoStab, TUL, Liberec, prosinec 2014, 31 str. (2014)
- [50] Hokr, M., Škarydová, I., Frydrych, D., Novák, J., Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení, 1. průběžná zpráva, TUL, Liberec, listopad 2014, 36 str. (2014)
- [51] Novák, J., Škarydová, I., Frydrych, D., Hokr, M., Balvín, A., Straka, T., Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení, Závěrečná zpráva, TUL, Liberec 98 str. (2013)
- [52] Hokr, M., Frydrych, D., Novák, J., Královcová, J., Škarydová, I., Balvín A., Bruský, I., Verifikace a validace metodik řešení modelových úloh s využitím experimentálních dat (podetapová zpráva 7.3), Zpráva TUL, Liberec, Revize 1, červen 2013, 47 str.(2013)
- [53] Novák, J., Škarydová, I., Frydrych, D., Hokr, M., Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení, Průběžná zpráva č. 3, TUL, Liberec 28 str. (2012)
- [54] Hokr, M., Novák, J., Královcová, J., Škarydová, I., Balvín A., Bruský, I., Rálek, P., Rosická D., Zhodnocení a doporučení pro využití modelů jako prediktivních nástrojů (podetapová zpráva 7.2), Zpráva TUL, Liberec, květen 2012, 62 str. (2012)
- [55] Novák, J., Hokr, M., Balvín, A., Frydrych, D., Škarydová, I., Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení, Průběžná zpráva č. 2, TUL, Liberec 40 str. (2011)
- [56] Hokr, M., Havlíček, J., Škarydová, I., Balvín A., Bruský, I., Šembera, J., Modelování proudění a transportu látky na lokalitě Bedřichov – 3D „Test Case“ v rámci mezinárodního týmu D-2011, Závěrečná zpráva, TUL, Liberec 70 str. (2011)