

# Obsah

Úvod	13
<b>I Vývoj modelů</b>	<b>25</b>
<b>1 Matematicko-fyzikální popis procesů v horninovém prostředí</b>	<b>27</b>
1.1 Porézní prostředí jako kontinuum	28
1.1.1 Darcyovské proudění	29
1.1.2 Kapilarita, retenční křivky a nesaturované prostředí	30
1.1.3 Rovnice kontinuity	32
1.2 Transport látky	35
1.2.1 Hydrodynamická disperze	35
1.2.2 Rovnice transportu látek v porézním prostředí	37
1.2.3 Nerovnovážná výměna v prostředí s dvojitou porozitou	39
1.2.4 Empirické modely sorpce	41
1.2.5 Proudění s nehomogenní hustotou	44
1.3 Chemické a geochemické interakce	46
1.3.1 Rovnovážné reakce	47
1.3.2 Kinetické reakce	47
<b>2 Numerické metody řešení</b>	<b>49</b>
2.1 Diferenciální rovnice	49
2.1.1 Klasifikace PDR druhého řádu	51
2.2 Formulace řešení úloh popsanych diferenciálními rovnicemi	53
2.2.1 Řešení počátečních úloh ODR	54
2.2.2 Silné řešení PDR	57
2.2.3 Metoda konečných diferencí	59
2.2.4 Slabé řešení PDR	62
2.2.5 Metoda konečných objemů	75

<b>3</b>	<b>Modely proudění podzemní vody</b>	<b>79</b>
3.1	Model ustáleného proudění podzemní vody . . . . .	79
3.1.1	Matematicko-fyzikální popis úlohy . . . . .	79
3.1.2	Odvození MH slabého řešení . . . . .	80
3.1.3	Diskretizace modelu užitím MH FEM . . . . .	81
3.1.4	Algoritmus výpočtu diskrétní soustavy . . . . .	84
3.2	Model neustáleného proudění . . . . .	86
3.2.1	Matematicko-fyzikální popis úlohy . . . . .	87
3.2.2	Odvození slabého řešení . . . . .	88
3.2.3	Diskretizace modelu užitím MH FEM . . . . .	89
3.3	Kombinovaný model . . . . .	90
3.3.1	Kompatibilní verze . . . . .	91
3.3.2	Nekompatibilní verze . . . . .	100
<b>4</b>	<b>Matematické modely úlohy transportu látek</b>	<b>101</b>
4.1	Základní charakteristiky numerického řešení konvekčně-difúzních úloh . . . . .	101
4.1.1	Upwind schéma pro rovnici konvekce . . . . .	101
4.1.2	Implicitní schémata . . . . .	104
4.1.3	Formulace metody konečných prvků pro konvekčně-difúzní rovnici . . . . .	105
4.1.4	Metoda rozkladu operátoru . . . . .	109
4.2	Řešení transportu s dvojitou porozitou pomocí rozkladu operátoru . . . . .	111
4.2.1	Úvod . . . . .	111
4.2.2	Popis úlohy . . . . .	112
4.2.3	Formulace metody rozkladu operátoru . . . . .	114
4.2.4	Řešení oddělené úlohy výměny mezi mobilní a imobilní formou . . . . .	115
4.2.5	Formulace pro konkrétní konečně objemovou diskretizaci . . . . .	116
4.2.6	Porovnání modelu s analytickým řešením . . . . .	118
4.3	Řešení transportu látky s imobilní zónou a adsorpce . . . . .	122
4.3.1	Popis modelu a řídicích rovnic . . . . .	122
4.3.2	Popis numerické metody . . . . .	125
4.3.3	Výpočetní testy . . . . .	128
4.3.4	Závěr . . . . .	131
<b>II</b>	<b>Aplikace</b>	<b>133</b>
<b>5</b>	<b>Geologická data pro matematický model</b>	<b>135</b>

5.1	Základní typy geologických dat a jejich využití v matematickém modelu . . . . .	136
5.1.1	Data geologická v širším slova smyslu . . . . .	136
5.1.2	Data strukturně geologická . . . . .	137
5.1.3	Data hydrogeologická a hydrologická . . . . .	138
5.1.4	Data hydrochemická . . . . .	140
5.1.5	Data geofyzikální . . . . .	140
<b>6</b>	<b>Řešení procesů ve Strážském bloku</b>	<b>143</b>
6.1	Charakteristika situace a řešených úloh lokality Stráž . . . . .	143
6.2	Kalibrace modelu transportu látek v prostředí s dvojí porozitou . . . . .	144
6.2.1	Popis modelu . . . . .	145
6.2.2	Použití numerické řešení . . . . .	147
6.2.3	Kritéria pro porovnávání . . . . .	147
6.2.4	Průběh kalibrace . . . . .	148
6.2.5	Výsledky . . . . .	153
6.3	Užití konceptu „trojí porozity“ pro vysvětlení zdánlivé závislosti parametrů na velikosti experimentu . . . . .	155
6.3.1	Dvojí a „trojí“ porozita . . . . .	156
6.3.2	Kolonové experimenty . . . . .	157
6.3.3	Závěr . . . . .	159
6.4	Vliv hustoty v rámci hydrogeologické situace v lokalitě Stráž pod Ralskem . . . . .	159
6.4.1	Úloha se zachováním geologických parametrů lokality . . . . .	160
6.4.2	Vyhodnocení vlivu gravitace v cenomanské zvodni . . . . .	164
6.4.3	Definice benchmarkové úlohy . . . . .	168
6.4.4	Výsledky benchmarkové úlohy . . . . .	170
6.4.5	Závěr . . . . .	174
<b>7</b>	<b>Lokalita Potůčky-Podlesí</b>	<b>175</b>
7.1	Geologie a hydrogeologie oblasti . . . . .	176
7.1.1	Metodika geologického výzkumu . . . . .	177
7.1.2	Příklady výsledků geologického výzkumu . . . . .	178
7.2	Simulace hydrogeologických experimentů . . . . .	184
7.2.1	Příprava modelu . . . . .	184
7.2.2	Výsledky simulací . . . . .	188
7.3	Regionální model oblasti Potůčky-Podlesí . . . . .	193
7.3.1	Realizace modelu . . . . .	193
7.3.2	Výsledky simulací . . . . .	196

<b>8</b>	<b>Lokalita Melechov</b>	<b>201</b>
8.1	Geologie a hydrogeologie oblasti . . . . .	201
8.1.1	Metodika výzkumu . . . . .	203
8.1.2	Výsledky hydrogeologického výzkumu . . . . .	204
8.2	Simulace vodní tlakové zkoušky . . . . .	207
8.2.1	Příprava modelu . . . . .	208
8.2.2	Simulační výpočty . . . . .	213
8.3	Regionální model oblasti . . . . .	226
8.3.1	Příprava modelu . . . . .	227
8.3.2	Výsledky modelu . . . . .	228
<b>9</b>	<b>Lokalita Cajamarca</b>	<b>235</b>
9.1	Popis oblasti . . . . .	235
9.1.1	Geologická stavba . . . . .	235
9.1.2	Hydrologické poměry . . . . .	241
9.2	Model oblasti . . . . .	242
9.2.1	Příprava modelu . . . . .	243
9.2.2	Výsledky simulací . . . . .	247
<b>10</b>	<b>Modelování THMC sdružených procesů</b>	<b>257</b>
10.1	Sdružený transport tepla a vlhkosti v bentonitu . . . . .	257
10.1.1	Úvod . . . . .	257
10.1.2	Formulace matematického modelu a význam parametrů . . . . .	258
10.1.3	Numerické řešení a implementace . . . . .	261
10.1.4	Formulace a výsledky řešení úlohy BM1.3 . . . . .	264
10.1.5	Formulace a výsledky řešení úlohy BM2.1 . . . . .	269
<b>11</b>	<b>Metodika automatického odhadu parametrů</b>	<b>279</b>
	<b>Závěr</b>	<b>287</b>