

**T A**

**Č R**

## **Odborná zpráva - řešení projektu Endorse v roce 2020**

Číslo projektu: TK02010118

Název projektu:

**Predikce vlastností EDZ s vlivem na bezpečnost a spolehlivost hlubinného úložiště radioaktivního odpadu.**

Předkládá:

organizace: **Technická univerzita v Liberci**

řešitel: **doc. Mgr. Jan Březina, Ph.D.**

organizace: **Ústav Geoniky**

spoluřešitel: **prof. RNDr. Radim Blaheta CSc.**

## 1 Úvod

V roce 2020 bylo řešení projektu poznamenáno pandemií COVID-19 jednak sníženou kapacitou, kvůli nutnosti řešit online vzdělávání a zejména pak v závěru roku onemocněním prof. Blahety s velmi vážným průběhem. Tato situace bohužel ovlivní řešení projektu i v příštím roce a to i přes značné nasazení dalších kolegů z UGN.

Ve druhém roce projektu byly řešeny následující aktivity:

- Definice vstupních dat a indikátorů bezpečnostních funkcí EDZ. (07/2019 - 07/2020)
- Vývoj modelu proudění a mechaniky na smíšených sítích (07/2019 - 12/2020)
- Matematické modely EDZ a související inverzní úlohy (1/2020 - 6/2021)
- Knihovny pro stochastické přímé a inverzní metody (07/2019 - 12/2021)

V tomto pořadí jsou popsány v následujících kapitolách 2 až 5. První aktivita byla zakončena milníkem v podobě rešeršní zprávy, viz. příloha. Milník druhé aktivity byl splněn časově. Dle plánu byl implementován hydro-mechanický model s diskretními puklinami. Pro správnou predikci hydraulické vodivosti je však na puklinách nutné uvažovat složitější model, jehož implementace bude pokračovat v následujícím roce. Řešení třetí aktivity bylo nejvíce zasaženo nedostatkem kapacit. Během roku se teprve upřesňovala její přesná náplň a proto se tým zatím věnoval ostatním aktivitám. S předstihem tak byl vytvořen model transportu popsaný v kapitole 6. V rámci poslední aktivity byla dokončena další verze knihovny pro MLMC a byly testovány pokročilejší metody rekonstrukce hustoty pravděpodobnosti. Efektivní algoritmy pro Bayesovskou inverzi byly testovány na jednoduchých hydro-mechanických úlohách.

## 2 Definice vstupních dat a indikátorů bezpečnostních funkcí EDZ

*Období aktivity:* 07/2019 - 07/2020

### 2.1 Popis aktivity dle přihlášky

V úzké spolupráci s aplikačním garantem budou navrženy indikátory bezpečnosti pro EDZ v okolí úložiště. Indikátory budou definovány buďto jako přímo měřitelné veličiny nebo jako veličiny odvozené od stavových veličin relevantních procesů (mechanika, proudění, transport). Další řešení projektu pak bude zaměřeno na predikci těchto indikátorů pomocí vhodných modelů příslušných procesů. Indikátory budou chápány jako náhodné veličiny vzhledem k nejistotám v parametrech modelů a budou predikovány jejich hustoty pravděpodobnosti. Pro určení klíčových parametrů zamýšlených modelů bude provedena rešerše dostupných apriorních dat (zejména dat pro Task G projektu Decovalex a data z podzemní laboratoře Bukov). Dále bude ve spolupráci s aplikačním garantem sestaven přehled geofyzikálních měření aplikovatelných v prostorách úložiště a bude odhadnuta jejich citlivost vůči parametrům modelů a finanční náročnost.

## 2.2 Řešení



Na základě konzultací s aplikačním garantem byla navržena definice indikátorů bezpečnosti EDZ. Indikátory jsou odvozeny od výsledků modelu popisujícího proudění a transport v okolí jednoho úložného vrtu. Je popsáno mechanický model na škále průměru úložného vrtu a jsou představeny různé varianty konstitutivních vztahů pro popis vzniku EDZ. Další kapitola je věnována empirickým vztahům pro závislost vodivosti a porozity na napětí a je představen možný víceškálový model, který by mohl umožnit přenos parametrů změřených v laboratorním měřítku na větší škály. V předposlední kapitole je uvedena rešerše měřících metod pro charakterizaci vlastností EDZ a v závěrečné kapitole je popsán návrh validační úlohy pro modely vyvíjené v rámci projektu s využitím existujících zahraničních dat a jsou stručně nastíněny možnosti realizace validačního experimentu na PVP Bukov.

## 3 Vývoj modelu proudění a mechaniky na smíšených sítích

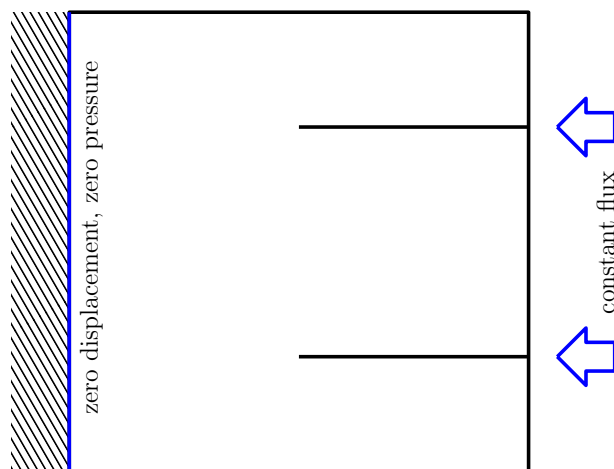
*Období aktivity:* 07/2019 - 12/2020

### 3.1 Popis aktivity

Cílem aktivity je vývoj výpočetních kódů pro modely proudění a mechaniky v EDZ. Pro efektivní implementaci různých vazeb mezi procesy bude existující simulátor Flow123d významně upraven s využitím knihovny FEniCS, to zahrnuje též implementaci podpory smíšených sítí do knihovny FEniCS. V SW Flow123d budou dále implementovány modely proudění a mechaniky na smíšených sítích s předpokladem malých deformací na puklinách. Bude vyvinut model pro sdružené hydro-mechanické (HM) úlohy založený na iteračním přístupu a vhodném předpokládání. Budou vyvinuty modely mechaniky s explicitním popisem puklin založené na SW GEM a PERMON. V první fázi půjde o mechanický model na smíšených sítích s pružným chováním matrice a s kontaktní formulací na trhlinách. Nerovnostní podmínka nepronikání na trhlinách bude řešena zavedením Lagrangeových multiplikátorů.

Aktivita má být zakončena milníkem: „Modely proudění a mechaniky na smíšených sítích“ zahrnujícím modely pro testování různých způsobů popisu proudění a mechaniky rozpukaného porézního média. Zejména bylo plánováno následující rozšíření existujících simulátorů:

- Simulátor Flow123d s podporou pro sdružené hydro-mechanické úlohy na smíšených sítích.
- Simulátor PERMON pro mechanický model na smíšených sítích s možností externího vstupu pórového tlaku a teplotní změny.



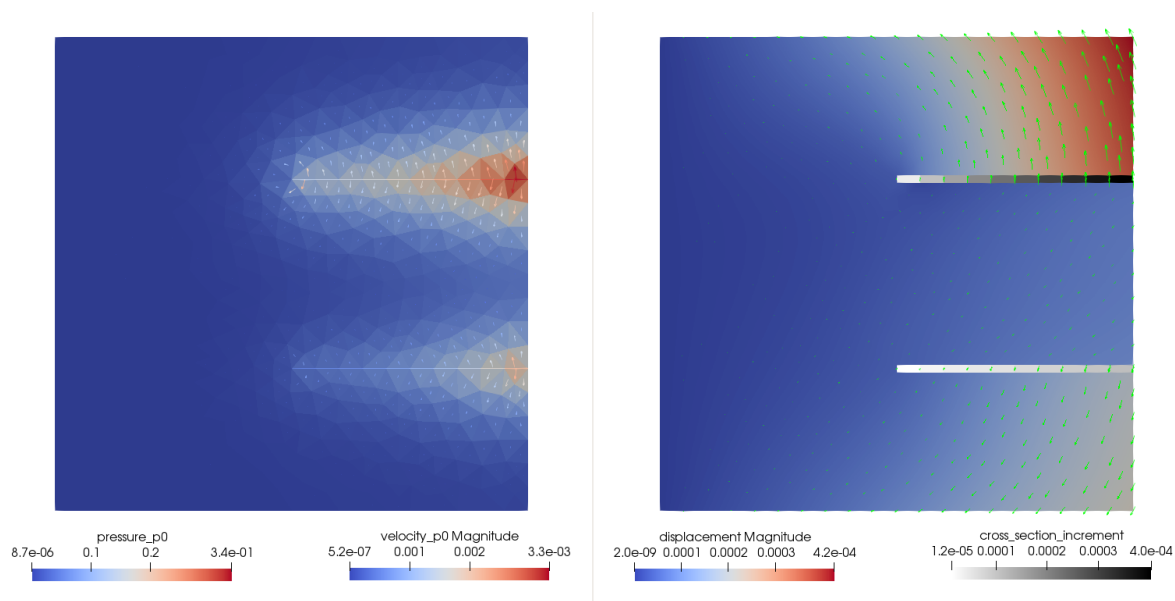
Obrázek 1: Demonstrační HM úloha: okrajové podmínky.

### 3.2 Poroelastický modul ve Flow123d (TUL)

V roce 2020 byl dokončen matematický model poroelastivity na smíšených sítích včetně jeho existenční analýzy. Byla odvozena optimální hodnota relaxačního parametru iteračního schématu „fixed-stress splitting“ a dokázána konvergence tohoto schématu. Výsledky byly sepsány a zaslány k publikaci v recenzovaném časopise [1]. Teoretické výsledky se promítly do implementace SW Flow123d, kde došlo k urychlení konvergence HM modelu díky vylepšené volbě relaxačního parametru a opravě chyby při výpočtu polí předávaných mezi řešičem proudění a mechaniky. Simulátor Flow123d tak nyní umožňuje řešení 3d úloh lineární poroelastivity s diskrétní reprezentací puklin.

Pro demonstraci hydro-mechanického modelu ve Flow123d byla zvolena 2D úloha s 2 puklinami: Pukliny mají 1000krát vyšší hydraulickou vodivost a 1000krát nižší Youngův modul než okolní prostředí. Skrz pukliny je do oblasti vtlačena tekutina, viz obr. 1 s popisem okrajových podmínek. Na obrázku 2 je pak zobrazeno pole tlaku a posunutí. Vzhledem k různým rozevřením puklin je deformace větší v okolí pukliny s větším rozevřením.

V souvislosti s řešením modelů EDZ v další fázi projektu byla studována možnost zahrnutí nelineárních interakcí na puklinách, zejména kontaktních podmínek (nepronikání), podmínek Coulombova tření a podmínek rozevírání vlivem smykového posunu. Tyto podmínky mají významný vliv na hodnotu hydraulické vodivosti homogenizovaného média [2]. Model s kontaktem byl výpočetně testován v prostředí FEniCS. V první fázi byl implementován s použitím primární formulace a Lagrangeova multiplikátoru. Tato formulace se ukázala nevyhovující jednak kvůli citlivosti na volbu diskretizačních prostorů a dále kvůli nestabilitě řešiče vzniklé optimalizační úlohy. Proto byla následně zvolena regularizační metoda, která je potenciálně použitelná také pro model s rozevíráním puklin a třením. Výsledný nelineární problém pak je řešen Newtonovou metodou. Předběžné výsledky testu na jednoduché 2D oblasti s 1 puklinou ukázaly, že tento postup je stabilní a při volbě dostatečně malého regularizačního parametru dochází k zanedbatelnému



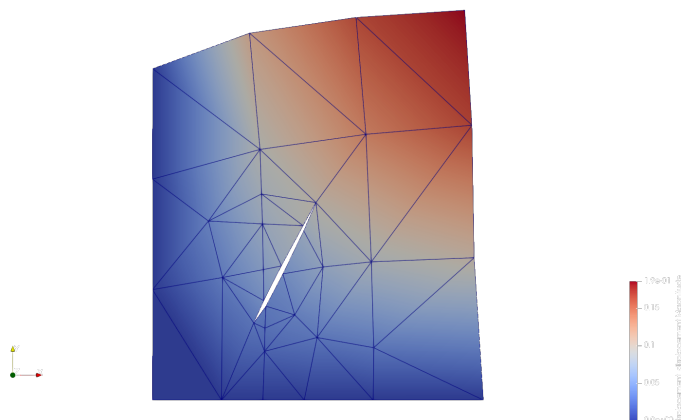
Obrázek 2: Demonstrační úloha: Vlevo pole tlaku a rychlosti, vpravo posunutí a rozevření puklin vlivem vtláčení.

porušení kontaktní podmínky. Zhoršuje se však podmíněnost úlohy, což může být limitující při řešení rozsáhlých úloh.

Lze konstatovat, že podstatná část plánovaného milníku byla splněna. Model nelineárních procesů na puklinách je nutný pro realizaci víceškálového přístupu a bude snaha jej proto dokončit v následujícím roce. Nicméně cílů projektu lze dosáhnout i s použitím konzervativnějších modelů.

### 3.3 Hydro-mechanický model s kontakty (UGN)

V rámci vývoje knihovny PERMON byl implementován generátor problémů lineární elasticity s puklinami. Funkčnost je prozatím omezena na 2D úlohy. K implementaci generátoru je využita



Obrázek 3

knihovna PETSc. Konečněprvková síť a práce na ní je implementována pomocí třídy DMPlex pro práci s nestrukturovanými sítěmi. Díky tomu je mimo jiné možné načítat sítě z několika formátů (např. Gmsh, ExodusII) a naopak ukládat výsledky do formátů jako VTP pro následnou vizualizaci. Pukliny implikují podmínky nepronikání, které jsou implementovány jako lineární nerovnostní omezení. Vzniklá úloha kvadratického programování je za pomoci knihovny PERMON dualizována a vyřešena algoritmem MPRGP. Výsledek řešení testovací úlohy je na obrázku 3.

## 4 Matematické modely EDZ a související inverzní úlohy

*Období aktivity: 1/2020 - 6/2021*

### 4.1 Popis aktivity dle přihlášky

Hlavní náplní aktivity bude studování modelů hydro-mechanických procesů v EDZ se zahrnutím vlivu puklin různých škál. K testování budou využita zejména data z Task G projektu Decovalex experiment TAS04 v ASPO) případně též dostupná data z podzemní laboratoře Bukov. Mechanické a hydraulické vlastnosti EDZ budou nejprve odhadnuty pomocí výpočtu napětí v EDZ a použitím modelů poškození. Bude též studován vztah mezi napětím a statistikami mikro puklin. Následně budou uvažovány jednak kontinuální poroelastické modely založené na duální pórovitosti a dále modely založené na kombinaci ekvivalentního porézního média a diskrétní puklinové sítě. Pro různé komplexní modely budou řešeny inverzní úlohy jak pomocí klasických optimalizačních metod tak pomocí Bayesovského přístupu, který popisuje hledané parametry pomocí statistického rozdělení pravděpodobnosti. Tento přístup vyžaduje výpočetně velmi náročné metody, je však robustnější a přináší více informací (např. kvalitu odhadu hledaných parametrů

### 4.2 Řešení

Tato aktivita představuje koncepčně nejnáročnější část projektu. Na základě rešerše v rámci aktivity 2 a po diskuzi v řešitelském týmu navrhujeme drobné změny a upřesnění postupu z přihlášky. Zaměřili bychom se na reprodukci a rozšíření hydro-mechanického modelu a inverzních úloh řešených v rámci projektu DECOVALEX-THMC project (2004–2007), Task A. V první fázi by šlo o zvládnutí jednoduchého modelu s využitím empirických konstitučních vztahů a založeného na existujících řešičích. Rychlé zvládnutí jednoduchého dopředného modelu umožní testování metod Bayesovské inverze. Metamodely, sloužící k urychlení výpočtu, lze pak využít k posouzení citlivosti měření na jednotlivé parametry modelu. Jednoduchý dopředný model lze následně nahradit víceškálovým modelem, jehož rozvoj závisí na zvládnutí nelinearity na puklinách a nástrojích pro generování regulárních sítí pro náhodné pukliny. Paralelně by probíhal vývoj robustnějšího simulačního nástroje v rámci Flow123d, který by zvládl i výpočet 3d úloh se zahrnutím heterogenity nebo složitějších experimentálních uspořádání.

V roce 2020 byly realizovány pouze testovací výpočty s využitím Druckerova-Pragerova kritéria.

## 5 Knihovny pro stochastické přímé a inverzní metody

*Období aktivity:* 07/2019 - 12/2021

### 5.1 Popis aktivity dle přihlášky

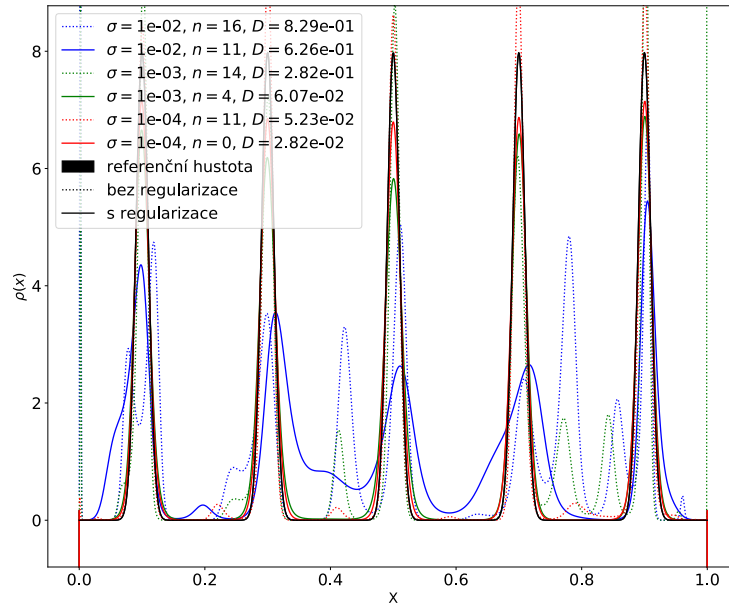
Aktivita je zaměřena na vývoj a aplikaci stochastických metod v úlohách simulujících hydro-mechanické procesy v EDZ. V první fázi bude formulován stochastický popis parametrů uvažovaných modelů včetně popisu rozdělení puklin. Následovat bude implementace víceúrovňové metody Monte-Carlo (MLMC) se zahrnutím různě detailního popisu puklinových sítí. Bude vyvinut nástroj pro tvorbu statisticky generovaných puklin a příslušných smíšených výpočetních sítí. Současně budou implementovány specifické metody pro Bayesovské inverze s využitím metody Metropolis-Hastings pro generování Markovského řetězce. Pro podstatné zvýšení efektivity se využije přibližný, náhradní (surrogate) model a příslušná varianta Metropolis-Hastings algoritmu (algoritmus se zpožděním).

### 5.2 Víceúrovňová metoda Monte Carlo a výpočty na puklinách (TUL)

Víceúrovňová metoda Monte Carlo představuje velmi efektivní metodu pro odhad střední hodnoty náhodné veličiny  $X$ , která je výsledkem numerické aproximace. Je využita hierarchie aproximací, kde s klesající přesností aproximace musí výrazně klesat čas výpočtu. Pro výpočty metodou konečných prvků lze obvykle získat vhodné aproximace použitím hrubších výpočetních sítí to však není přímo možné pro smíšené sítě zahrnující diskrétní reprezentaci puklin. Nelze vygenerovat hrubší síť bez odstranění puklin. Za tímto účelem byl vyvinut postup nahrazení puklin pomocí heterogenního anisotropního kontinua. V letošním roce byla testovány statistické vlastnosti rozdílu mezi výpočtem na jemné síti s puklinami a výpočtem na hrubé síti s náhradou pomocí heterogenního kontinua. Pro případ 2d úlohy proudění bylo ověřeno, že lze takto získat dobrou aproximaci. Otestování celé víceúrovňové metody na puklinových sítích bude pokračovat v dalším roce.

Metoda MLMC umožňuje pouze odhad střední hodnoty, pro bezpečnostní analýzy je však vhodné znát spíše kvantily indikátorů bezpečnosti. Za tímto účelem rozvíjíme metodu rekonstrukce hustoty pravděpodobnosti pomocí metody maximální entropie. V letošním roce byla vyvinuta regularizační technika, která omezuje výskyt nežádoucích oscilací při nedostatečné přesnosti odhadu momentů. Na obrázku 4 je demonstrován pozitivní efekt na testovacím rozdělení. Dále byla otestována rekonstrukce hustoty pro bivarietní náhodné veličiny.

V rámci paralelně řešeného projektu TAČR (GeoPax) byla dokončena první robustní verze knihovny pro MLMC v příštím roce předpokládáme vyladění technik regularizace a podpory



Obrázek 4: Rekonstrukce hustoty pravděpodobnosti bez regularizace a s jejím použitím pro různé úrovně přesnosti odhadu momentů. Pro méně přesné momenty lze pozorovat výrazné omezení nežádoucích oscilací při použití regularizace.

bivarietních rozdělání a začlenění do produkční verze knihovny. Uvedené techniky budou také otestovány na úlohách pro predikci indikátorů bezpečnosti.

### 5.3 Bayesovské inverzní metody (ÚGN)

Bayesovská inverze je přirozeným nástrojem pro odhad neznámých parametrů matematického modelu na základě odezvy modelu zatížené nejistotami způsobenými například chybami měření. V roce 2020 tým ÚGN pokračoval ve vývoji metod pro efektivní numerickou realizaci Bayesovské inverze. Numerická realizace spočívá v generování snímků z aposteriorního rozdělání neznámých parametrů, což vyžaduje vysoký počet vyhodnocení modelu. Pro zvýšení efektivity používáme algoritmus Metropolis-Hastings se zpožděným přijetím (DAMH), ve kterém jsou některá vyhodnocení modelu nahrazena vyhodnocením výpočetně levnějšího zástupného modelu (*eng. surrogate model*). V případě velmi vysoké výpočetní náročnosti matematického modelu je rovněž možné přejít k plnému nahrazení zástupným modelem.

Hlavním výsledkem je vývoj a implementace zástupných modelů, které lze využít v přímých i inverzních úlohách s nejistotami. Věnovali jsme se efektivní implementaci stochastické Galerkinovy metody, která slouží řešení k lineárním úloh s nejistotami. Dále jsme implementovali polynomiální zástupný model, který je v průběhu DAMH algoritmu dále zpřesňován pomocí nově získaných vyhodnocení původního modelu. Model je neintruzivní a tedy široce využitelný. Při využití snímků ke zpřesňování modelu se nabízí více strategií, které budou dále testovány.

Popsaný přístup byl aplikován na vybrané hydro-mechanické úlohy, byl proveden odhad hydraulické vodivosti a parametrů trhliny na základě nepřesných měření toku na hranici oblasti. Dále



byly navrženy inverzní úlohy, které je možné řešit v rámci analýzy propustnosti EDZ. Aplikace vyvinutých metod na navržené úlohy je umožněna díky neintruzivnímu charakteru používaných algoritmů a je součástí plánu na příští rok. Efektivita je dána vlastnostmi a výpočetní náročností konkrétního modelu; rovněž závisí na tom, jak přesnou aproximaci daného modelu je možné sestrojit.

*Publikované články:*

R. Blaheta, M. Běreš, S. Domesová, J. Haslinger, D. Horák. Inverse problems for identification of the hydraulic conductivity of rocks, fractures and excavation damage zones (EDZ). Proceedings of Geotechnika 2020, Soláň, September 10-11, 2020.

Příspěvek se věnuje řešení inverzních úloh identifikace materiálových parametrů hornin (např. hydraulické vodivosti). Je uvažován porézní materiál s trhlinami, které mohou být zahrnuty v kontinuálním modelu, nebo modelovány explicitně. Jsou navrženy dva přístupy k analýze propustnosti EDZ. Dále je porovnáno použití deterministických a stochastických metod. Stochastický (Baysovský) přístup je robustnější, poskytuje více informací o neznámých parametrech, ale je výpočetně velice náročný, vyžaduje tedy další výzkum v oblasti efektivní numerické realizace.

M. Běreš. A comparison of approaches for the construction of reduced basis for stochastic Galerkin matrix equations. Applications of Mathematics, 65(2), 191-225, 2020.

Stochastická Galerkinova metoda umožňuje řešení lineárních úloh s nejistotami v parametrech v rámci monolitické soustavy lineárních rovnic v tenzorovém formátu. Článek se zabývá efektivní implementací stochastické Galerkinovy metody, porovnává několik přístupů ke konstrukci reduktované báze. Tento přístup přirozeně slouží k řešení přímých úloh s nejistotami a také může být použit jako zástupný model pro Bayesovskou inverzi.

S. Domesová, M. Běreš, R. Blaheta. Efficient implementation of the Bayesian inversion by MCMC with acceleration of posterior sampling using surrogate models. Proceedings of IACMAG 2020. LNCE 125, Springer (přijato)

Příspěvek je zaměřen na využití neintruzivních zástupných modelů ke zvýšení efektivity Markov chain Monte Carlo metod. Výsledkem je proces generování vzorků z aposteriorního rozdělení, který má díky neintruzivnímu charakteru obecné využití. Zde byl přístup aplikován na dvě modelové úlohy hydromechaniky (odhad hydraulické vodivosti, odhad rozevření trhliny).

M. Běreš, R. Blaheta, S. Domesová, D. Horák. Numerical methods for simulation of coupled hydro-mechanical processes in fractured porous media. Proceedings of IACMAG 2020. LNCE 125, Springer (přijato)

Témata, kterým se věnuje ÚGN (vývoj hydro-mechanického modelu s kontakty v trhlinách a Bayesovské inverzní metody) spolu úzce souvisí. Tento příspěvek je zaměřen na numerické řešení hydro-mechanických úloh v porézním prostředí s trhlinami modelovanými explicitně. Hlavním výsledkem je zajištění podmínky nepronikání a řešení kontaktu v trhlinách pomocí Lagrangeových multiplikátorů. Dále jsme pokročili ve vývoji iteračních metod pro řešení výsledných sdružených

úloh. Výsledný model slouží jako aplikační úloha pro Bayesovskou inverzi.

## 6 Modelý transportu (TUL)

Jelikož se pozdrželo plánování aktivity 4, byl zatím s předstihem realizován model proudění a transportu, viz. příloha „model\_transportu.pdf“, který byl plánován jako součást aktivity "Vývoj specializovaného nástroje pro predikci indikátorů bezpečnosti" začínající v roce 2021. Model zahrnující stacionární proudění a transport konzervativního stopovače s difúzí a disperzí je realizován simulátorem Flow123d a bude sloužit k vlastnímu výpočtu indikátorů bezpečnosti. Celý model včetně procedurálně generované geometrie a výpočetní sítě je parametrizován a umožní tak jednak snadnou úpravu s ohledem na konkrétní lokalitu, tak stochastické výpočty nebo inverzní úlohy pro použité parametry.

Na základě realizovaných výpočtu byly identifikovány následující problémy, které je třeba dále řešit:

- Program GMSH použitý pro přípravu geometrie a výpočetní sítě má problémy s tvorbou sítě pro větší počet puklin, nebo v případě složitějších průniků s geometrií chodeb. Zdá se, že pro řešení problému je třeba najít způsob jak přesněji definovat krok sítě, tak abychom dosáhli adaptivního zjemnění pouze v okolí chodeb a jejich průsečíků s vrty.
- EDZ je popsána pouze jednou vrstvou elementů o tloušťce 2m. Je třeba zvládnout přesnější popis EDZ aniž by došlo k výraznému nárůstu počtu elementů. Bude snaha využít anisotropních elementů pro zjemnění pouze ve směru kolmém na stěnu chodeb.
- Při použití větších časových kroků vykazuje použité DG výpočetní schéma transportu výrazné oscilace. Tomu snad lze zabránit pečlivější volbou regularizačního parametru, nebo použitím metody vyššího řádu.
- Pro účely vyhodnocení indikátorů bude třeba simulátor Flow123d doplnit o výstup některých hodnot na hranici oblasti.

### 6.1 Analytický transport

Bylo implementováno analytické řešení advekčně-difúzní rovnice v 1D. Řešení postihuje procesy advekce, difúze a lineární sorpce. Řešení rovněž umožňuje zahrnout rozpadový člen a ředění.

Výpočet byl implementován v jazyce Python. Výsledná třída umožňuje pro zadané parametry konstrukci konvolučního jádra, které je pak možno aplikovat pro různý průběh koncentrace na vtokové hranici modelové domény.

Výstupy SW byly na zvolené testovací úloze ověřeny proti výstupům simulátoru Flow123d. Testovací úlohy byly počítány s parametry uvedenými v Tabulce 2, kde  $K_d$  je distribuční koeficient lineární sorpce,  $L$  je délka modelové domény,  $\rho$  je hustota a  $T$  je simulační perioda. Byly spočteny 4 varianty sad hodnot rychlosti a efektivní difuzivity (viz Tabulka 1). Analytické řešení

výpočet pro nulovou difúzi (vedlo na dělení nulou), ve variantě v0 je proto počítáno s hodnotou 0,01.

Výsledky všech variant testovací úlohy jsou znázorněny na Obrázku 5. Z výsledků je patrná relativně dobrá shoda. Pro úlohy s převažující advekcí se silně ve výsledcích Flow123d silně projevuje numerická difúze.

Tabulka 1: Varianty modelu 1D transportu.

	v0	v1	v2	v3
rychlost [ $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ]	10	10	10	10
De [ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ]	0	1	10	100

Tabulka 2: Parametry modelu 1D transportu.

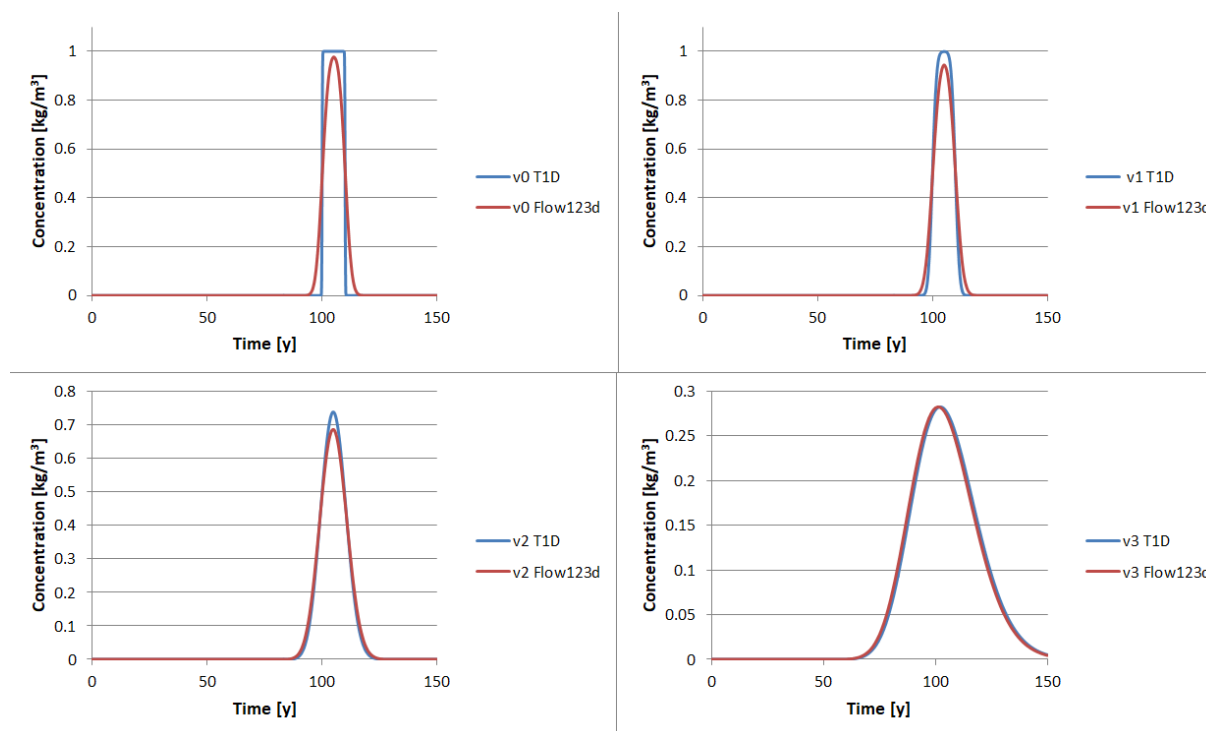
porozita	1
Kd	$0 \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}$
L	1000 m
Rho	$2700 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$
T	150 let

## 7 Závěr

Během roku 2020 byly realizovány přípravné vývojové práce a byl upřesněn postup dosažení výsledků projektu tak, aby vývoj jednotlivých modelů byl pokud možno nezávislý. Za tímto účelem budou nejprve realizovány jednoduché modely založené na existujících kódech, aby bylo možno testovat stochastické výpočty, Bayesovské inverze a integraci celého výpočtu. Následně budou jednotlivé komponenty iterativně vylepšovány nebo nahrazeny pokročilejším modelem. Toto se týká zejména pokročilých modelů mechaniky a víceškálového modelu pro určení parametrů EDZ.

S ohledem na dosavadní průběh řešení navrhujeme následující změny v harmonogramu projektu:

- Aktivita "Vývoj modelu proudění a mechaniky na smíšených sítích", bude pokračovat v roce 2021 s cílem zvládnout kontakty, tření a rozevírání puklin. Bude otestován přístup, kdy jsou tyto jevy modelovány pomocí nelineární závislosti mezi tenzorem napětí a deformace. Tento přístup se jeví jako fyzikálně relevantnější a z praktického hlediska umožňuje značnou flexibilitu ve volbě konkrétního konstitutivního vztahu. Do konce roku 2021 bude tento přístup ověřen a pokud se osvědčí bude možno v rámci projektu realizovat víceškálový model EDZ.
- Aktivita "Matematické modely EDZ a související inverzní úlohy" bude prodloužena až do konce roku 2021 s cílem reprodukovat výsledky HM modelů pro data z experimentu TSX (za



Obrázek 5: Výsledky testovací úlohy 1D transportu - porovnání analytického řešení a Flow123d

předpokladu přístupu k datům). Pro co nejjednodušší model bude otestováno použití metod pro Bayesovskou inverzi s cílem získat informaci o rozdělení parametrů modelu. Původně zamýšlené využití dat z experimentu TAS04 v ASPO nebude realizováno, předchozí snahy více týmů postihnout naměřená data byly neúspěšné.

- Realizace aktivity "Predikce indikátorů bezpečnosti" bude validována s využitím dat z experimentu TSX.

<https://www.overleaf.com/project/5f96de4f6737be000157632c>

První půlrok řešení byl věnován rešerši, komunikaci mezi partnery a upřesnění postupu řešení projektu. Nebyly plánovány žádné milníky, první milník je plánován v polovině roku 2020 má zahrnovat především definici indikátorů bezpečnosti, ale to zahrnuje i upřesnění plánovaných modelů a rozvahu o dostupnosti vstupních dat modelů. Předběžná podoba tohoto dokumentu je v příloze `koncept_metodiky.pdf`.

Pro rok 2020 budeme postupovat v souladu s plánovanými aktivitami. Nicméně na základě předběžných experimentů s knihovnou FEniCS se zvládnutí její integrace s Flow123d jeví jako velmi nereálné. V tomto úsilí budeme pokračovat, ale plánované HM modely budou zatím vyvíjeny nezávisle.

T A

Č R

REFERENCE

## Reference

- [1] Jan Březina and Jan Stebel. Mixed-dimensional models of poroelasticity. [https://astra.nti.tul.cz/~jan.stebel/pub/biot\\_fracture.pdf](https://astra.nti.tul.cz/~jan.stebel/pub/biot_fracture.pdf), 2020.
- [2] Ki-Bok Min, J. Rutqvist, Chin-Fu Tsang, and Lanru Jing. Stress-dependent permeability of fractured rock masses: a numerical study. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 41(7):1191–1210, October 2004.