

OBSAH

ÚVOD	2
I SEKCE HORNINOVÉ PROSTŘEDÍ	5
1 Výzkum puklinového a porézního prostředí v souvislosti s kontaminací horninového prostředí a podzemních vod	5
2 Prostorové modelování geologické stavby pánevních oblastí.....	10
II SEKCE SPECIÁLNÍ TECHNOLOGIE	11
1 Výzkum fytořemediace a použití huminových látek pro sanace těžkých kovů	11
2 Výzkum možností odstranění kontaminace za použití mikroorganismů	14
3 Výzkum a vývoj použití oxidačních a reduktivních metod pro sanace organických látek a těžkých kovů	17
4 Výzkum a vývoj použití nanovláken pro sanační praxi	19
III SEKCE MODELOVÁNÍ	22
1 Výzkum metod kalibrace a verifikace modelů.....	22
2 Výzkum a implementace modelů proudění podzemních vod	24
3 Výzkum a implementace modelů transportu látek v horninovém prostředí.....	26
4 Výzkum metod pro řešení rozsáhlých řídkých systémů lineárních rovnic.....	30
5 Vývoj preprocesorů a postprocesorů pro přípravu dat a grafické výstupy.....	31
6 Výzkum metod a nástrojů pro hodnocení následků působení chronických zátěží	33
IV SEKCE INFORMATIKY	38
1 Zajištění komunikace mezi sekcemi, předávání výsledků a koordinaci činností	38
2 Návrh a implementace technologií sémantického webu a moderních databázových technologií.....	39
V UPLATNĚNÉ VÝSLEDKY APLIKOVANÉHO VÝZKUMU	41
1 Matematické modelování pohybu fluid v puklinovém prostředí testovací lokality	41
2 Modelování hydrogeologických situací v oblasti Cajamarca	41
3 Výzkum procesů pole blízkých interakcí hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů	42
1 Modelování termo-hydro-mechanických dějů v bentonitu	42
2 Tvorba programového nástroje pro automatickou kalibraci koeficientů hydraulické vodivosti a řešerše automatických generátorů sítí.....	43
3 Expertní systém pro řízení podzemních zásobníků plynu.....	43
4 ČEZ, a.s. - Jaderná elektrárna Dukovany.....	44
5 Spolehlivost a bezpečnost provozu v České rafinérské, a.s.	44
6 Posouzení efektivnosti alternativních zdrojů energie.....	45
7 Výchova doktorů v doktorském studijním programu P2612 Elektrotechnika a informatika ve studijním oboru „Přírodovědné inženýrství“	46
ZÁVĚR	48

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	1 (50)

Úvod

Tato zpráva obsahuje souhrn prací a výsledků, kterých dosáhli pracovníci Výzkumného centra Pokročilé sanační technologie a procesy za roky 2005 a 2006. Zadání výzkumných úkolů a práce na jejich řešení byly převážně organizovány v rámci jednotlivých sekcí. Pouze komplexní úkoly propojovaly činnost několika sekcí a uplatňovaly vyvíjené technologie a metodiky při řešení problémů průmyslové praxe. Cílem této zprávy shrnující činnosti za období prvních dvou let existence Centra ARTEC proto mimo jiné je i provedení inventury dosažených výsledků ve srovnání s plánem projektu a možnosti jejich průmyslového uplatnění. Struktura Souhrnné zprávy reflektuje strukturu projektů centra realizovaných v jednotlivých sekcích .

V sekci Horninové prostředí byly řešeny dva základní úkoly a několik úkolů dílčích. První z hlavních úkolů shrnuje výsledky terénního výzkumu granitů a jejich hydraulických a dalších vlastností rozhodujících pro posouzení bezpečnosti v případě, že by do takového prostředí bylo situováno úložiště zvláště nebezpečných (například radioaktivních) odpadů. Technické práce a terénní experimenty byly hrazeny z projektu MŽP (na lokalitě Potůčky v Krušných horách) a zakázky Správy úložiště radioaktivních odpadů (SÚRAO) na výzkumu vlastností melechovského masívu. Druhý rozsáhlý úkol byl zaměřen na použití nových metodik pro hodnocení úniku toxických látek ze skládek toxických odpadů horninovým prostředím (studium na lokalitě Pozdátky na Třebíčsku). Dílčí úkoly sekce se pak soustředily na experimenty dvojice řešitelů s technologickým roztokem z chemické těžby uranového ložiska Stráž s cílem posouzení chování koloidních částic. Úkol zapadá do problematiky komplexního projektu imobilizace toxické kontaminace in situ v horninovém prostředí. Dalším samostatným úkolem bylo modelování industriální acidifikace půd a vod a predikce jejího vývoje ve zvolené lokalitě. Konečně skupina řešitelů zpracovávala informace z Geofondu a tvořila 3D model geologických útvarů v oblasti české křídové pánve jakožto jednoho z podkladů pro hodnocení vývoje různých typů průmyslové kontaminace v české křídové pánvi.

Sekce Speciální technologie je koordinována z pracoviště TUL přičemž na řešení se podílejí všichni ostatní spoluřešitelé včetně dalších odborníků z jiných institucí. Tato sekce vyvíjí nové sanační technologie, zkoumá jejich použití a ověřuje jejich účinnost na vybraných lokalitách. Jedním ze studovaných směrů je výzkum vlastností huminových látek s cílem ověřit možnosti jejich použití pro sanaci těžkých kovů a jiných toxických kontaminantů in situ, přímo v horninovém prostředí. Dílčí výzkumné úkoly sekce se zabývají i hodnocením účinnosti in situ odstranění kontaminace za použití mikroorganismů jak v horninovém prostředí tak i eliminací mikrobiální kontaminace povrchových vod (sinice). Výzkumné úkoly sekce jsou rovněž soustředěny na studium funkčních skupin buněčných povrchů pro vazbu iontů těžkých kovů a studium možnosti využití matematického modelování pro koncepční pochopení a popis současně probíhajících eutrofizačních procesů ve vodních nádržích. Výzkum a vývoj použití oxidačních a reduktivních metod pro sanace organických látek a těžkých kovů v horninovém prostředí byl zaměřen na posouzení použitelnosti a efektivnosti jednotlivých metod. Byly prováděny soubory laboratorních zkoušek a pilotních ověření vybraných metod na konkrétních kontaminovaných lokalitách. Metodika prací zahrnovala vytvoření standardních metodických postupů, získávání klíčových parametrů pro dimenzování sanačních prací a provoz sanací, studium účinnosti (a zejména mezi účinnosti činidel při odbourávání kontaminantů) včetně vlivu různých složek horninového prostředí. Další dílčí úkol sekce Výzkum a vývoj použití nanovláken pro sanační praxi ověřoval

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	2 (50)

možnosti aplikací nanovláken pro sanační účely. Na základě dosažených výsledků budou realizovány detailnější experimentální práce k vývoji nejzajímavějších aplikací jako jsou vlastní technologické postupy aplikace nanovláken jako nosičů biologického materiálu (bioremediace), aplikace pokovených nanovláken jako katalyzátorů k zvýšení redukčních vlastností elementárního nanoželeza v kontaminovaných roztocích (kombinace nanovláken a nanoželeza) a dále jako nosičů fotocitlivých látek, kde aplikace jsou předmětem hledání.

Sekce Modelování je koordinována z pracoviště TUL. Výzkum metod kalibrace a verifikace modelů byl zaměřen na prověření možností stanovení algoritmického postupu při nastavování volitelných parametrů úloh pro dosažení shody výsledků modelu s výsledky měření. Dosavadní zkušenosti ukazují, že hledání obecného postupu kalibrace pro málo definované horninové struktury nemá očekávané výsledky. Výzkum a implementace modelů proudění podzemních vod je zaměřen na vytvoření souboru programových produktů, které budou zahrnovat všechny podstatné informace o horninovém prostředí. Cílem je vytvoření geologicky i fyzikálně přesného modelu prostředí a procesů, který bude schopen poskytovat výsledky pro navazující transportní modely a následné hodnocení i z hlediska ekologických rizik. Výzkum a implementace modelů transportu látek v horninovém prostředí je rozdělen do dvou dílčích částí – modelování transportních jevů a modelování chemických reakcí. Modely transportních procesů byly rozšířeny o vlivy dvojí porozity, teploty a heterogenního rozdělení koncentrací rozpuštěných látek. Řešení tematiky modelování chemických reakcí bylo na TUL zahájeno se vznikem Výzkumného centra. Řešené úkoly zahrnovaly oxidačně-redukční děje, neutralizaci probíhající při mísení kyselých cenomanských vod a geochemické děje probíhající při dlouhodobém transportu dešťové vody masivem s obsahem vápníku. Každý z uvedených dějů má vazbu na některý z komplexních úkolů Centra. Výzkum metod pro řešení rozsáhlých řídkých systémů lineárních rovnic je orientován především na uplatnění vyvíjeného softwaru pro řešení rozsáhlých úloh reálného prostředí. V rámci vývoje preprocesorů a postprocesorů pro přípravu dat a grafické výstupy jsou vyvíjeny počítačové nástroje, které umožní zefektivnění prací spojených s přípravou a interpretací vstupních dat a výsledků modelování. Hlavním cílem je naplnění výpočetní sítě z databází fyzikálních a chemických parametrů horninového prostředí. Konečně výzkum metod a nástrojů pro hodnocení následků působení chronických zátěží je zaměřen na kvantifikaci ekologických škod a hodnocení efektivnosti procesů jejich zmírňování v ekonomických ukazatelích. V první etapě byly formulovány základní ekonomické postoje k posouzení efektivnosti sanačního procesu v obecné rovině, vycházející ze vztahu nákladů prevence ekologických škod a ekonomického vyhodnocení jejich dopadu. Ekonomické aspekty managementu rizik zahrnují dva základní cíle – ekonomické hodnocení skutečných nebo potenciálních ekologických škod a ekonomické hodnocení efektivnosti nápravných nebo preventivních opatření.

Sekce Informatiky je zaměřena na zajištění infromatických potřeb všech sekcí centra, ke sdílení informací jednotlivými sekcemi při řešení jak vlastních úkolů, tak i úkolů komplexních. Sekce je řízena Ústavem informatiky AV ČR přičemž do řešení úkolů jsou zapojováni také pracovníci centra z TUL. V první etapě řešení byl zpracován návrh struktury webového portálu a jeho implementace. Správa webového serveru a doplnění jeho informační struktury je trvalým úkolem sekce. Vzhledem k dosaženým výsledkům v ostatních sekcích budou pracovníci této sekce plnit v budoucnu i úkoly návrhu struktury databází.

V části Uplatněné výsledky aplikovaného výzkumu je uvedeno stručné shrnutí úkolů řešených s podporou neveřejných zdrojů a výsledky komplexního úkolu výchovy doktorandů.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	3 (50)



Tato zpráva je přehledem problematiky řešené v rámci Výzkumného centra za uvedené období. Podrobné výsledky jednotlivých řešitelských kolektivů jsou uvedeny v dílčích kapitolách připravované publikace.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	4 (50)

I SEKCE HORNINOVÉ PROSTŘEDÍ

Zodpovědný řešitel: Tomáš Pačes

Sekce Horninové prostředí se zaměřuje na výzkum metod získávání geologických, geochemických, hydrogeologických a geofyzikálních (karotáž) informací o horninovém prostředí. Výsledky výzkumu jsou soustředěny v databázi GIS a následně využívány sekcí Modelování. Sekce zahrnuje dva samostatné výzkumné úkoly, a to:

HP-1: Výzkum puklinového a porézního prostředí v souvislosti s kontaminací horninového prostředí a podzemních vod

HP-2: Prostorové modelování geologické stavby pánevních oblastí

Tyto dva výzkumné úkoly jsou zajištěny a koordinovány z pracoviště ČGS. Na některých aktivitách a měřeních se podílejí i pracovníci Aquatestu (karotážní měření).

1 Výzkum puklinového a porézního prostředí v souvislosti s kontaminací horninového prostředí a podzemních vod

Na řešení se podíleli: Lenka Rukavičková, Vladimír Bláha, Tomáš Pačes, Martin Novák, Lucie Erbanová, Petra Pacherová, Jan Holeček

Výzkum je orientován do několika podúkolů a to:

- Hydrogeologický a hydrogeochemický výzkum puklinového kolektoru žulového pně v Podlesí a žulových těles melechovského masivu.
- Výzkum původu a redukce disperze toxických prvků ze skládky Pozďátky na třebíčsku.
- Výzkum koloidních částic z uranového ložiska Stráž.
- Modelování acidifikace půd a vody a jejího vývoje.

Hydrogeologický a hydrogeochemický výzkum puklinového kolektoru žulového pně v Podlesí a žulových těles melechovského masivu

Do puklinového prostředí pevných hornin jsou v současné době projektovány zásobníky a úložiště různého typu včetně hlubinného úložiště vysoce radioaktivních odpadů. Pro bezpečnostní analýzy projektů jsou nezbytné matematické modely proudění podzemních vod založené na dobré znalosti hydraulických a geochemických vlastností puklinového prostředí.

Hydraulické a hydrochemické vlastnosti rozpukaných žulových masivů jsou zkoumány na dvou lokalitách Českého masivu. Je to lokalita Podlesí u Potůčků v Krušných horách (3 vrty) a melechovský masiv na Českomoravské vysočině (5 vrtů). Tyto lokality zahrnují čtyři typy granitů. Na osmi hydrogeologických vrtech sahajících do hloubky od 150 do 350 bylo provedeno 230 hydrodynamických zkoušek. Zkoušky byly prováděny etážově na izolovaných úsecích vrtů v délkách od 1 m výše. Reakce na hydrodynamické zkoušky jsme monitorovali v několika izolovaných úsecích okolních vrtů pomocí multipakového systému. Rozsáhlý datový soubor poskytl v rámci České republiky nové informace o hydraulických vlastnostech puklinového prostředí granitů. Jde o piezometrické poměry puklinových

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	5 (50)

systemů, hloubkové profily hydraulické vodivosti masivu, identifikaci hlavních vodivých puklin a míry jejich propojení v prostoru mezi vrty. Rozpukané masivy granitů mají v závislosti na počtu a charakteru puklin velký rozsah koeficientů filtrace. Otevřené pukliny v poruchových pásmech mají v průměru koeficient filtrace 10^{-5} m/s, zatímco neporušený granit a granit uzavřenými, nebo sekundárně vyplněnými puklinami má tento koeficient řádově 10^{-10} m/s. Četné hydraulické zkoušky v izolovaných hloubkových etážích umožnily podrobně popsat změny koeficientů filtrace v závislosti na charakteru puklinového systému v kompaktním granitu.

Hydrodynamické parametry získané při terénním měření jsou zpracovány do přehledných datových souborů, tabulek a grafů. Ve své primární formě jsou to záznamy spotřeb při vodních tlakových zkouškách a záznamy komunikace mezi vrty, které jsou využívány pro simulaci na puklinových modelech proudění podzemních vod. Odvozená data zahrnují koeficienty filtrace vypočítané podle analytických vzorců a slouží jako vstupy do modelů regionálního charakteru.

V roce 2006 bylo pokračováno v monitorování pomalého vertikální proudění vody ve vrtech PTP-3 a PTP-4A na lokalitě Potůčky-Podlesí. Karotážní monitorování přírodního proudění vody ve vrtech spočívá ve spojitém měření rezistivimetrie, kde lze sledovat posun dříve vytvořených anomálií elektrického odporu vody. Objemová rychlost proudění se s rostoucí hloubkou snižuje, maximální přírodní proudění vody ve vrtech dosahuje cca $1,1 \text{ m}^3/\text{rok}$.

Měsíčně jsou z vrtu PTP-5 v Podlesí odebírány vzorky podzemní vody ze čtyř hloubkových etáží nacházející se v rozmezí 61–111 m, 111–161 m, 161–220 m a 220–300 m pod úrovní terénu. Hydraulická vydatnost v tomto granitu je nepatrná.

Bylo zjištěno, že se chemické složení podzemní vody ani po 452 dnech měsíčních odběrů neustálilo. Jednotlivé hlavní i stopové složky vody se s časem chovají různě. Např. Fe a Mn po prvním či druhém odběru klesly pod citlivost analytické metody. Naopak molybden a z hlavních složek sodík a vápník se neustálily a většinou jejich koncentrace klesala. Neobjasněný zůstává původ organického uhlíku rozpuštěného ve vodě v nejnižší etáži. Z této etáže se organické látky šířily do vyšších etáží a s časem ve všech etážích klesaly. Přesto i po 452 dnech monitorování jsou obsahy organického uhlíku neobvykle vysoké. Z těchto pozorování plyne, že v masivech s extrémně nízkou propustností se vlastnosti podzemní vody po odvtřání a hydraulickém testování vrtu ustalují velmi dlouhou dobu a proto je možné odebrat reprezentativní vzorek vody, který bude charakterizovat její složení v ustáleném stavu, až po uplynutí několika měsíců až let.

Výzkum původu a redukce disperze toxických prvků ze skládky Pozďátky na třebíčsku

Skládka toxického odpadu Pozďátky byla studována mineralogickými, hydrochemickými a izotopovými metodami. Půda na svahu pod skládkou je pokryta krustou rezavé barvy, v níž byly identifikovány jarosit, goethit, sádrovec, oxyhydroxidy Fe a řada amorfních fází. Krusta s vysokými obsahy železa (až 42 hmotnostních % Fe) pokrývá plochu o rozloze 1 ha. Byla vzorkována na 12 místech. Průměrné koncentrace chrómu (2100 ppm) a vanadu (2000 ppm) v krustách jsou 21krát a 16krát vyšší než průměrné koncentrace těchto prvků v jílových minerálech zemské kůry. Koncentrace Zn, Cu, Pb, As, Sb, Cd a Hg v krustách jsou nižší než koncentrace těchto prvků v jílových minerálech průměrné zemské kůry, a to přesto, že na skládce byly uloženy průmyslové odpady s vysokými obsahy těchto prvků. Zelená skalice nasáklá kyselinou sírovou, rovněž uložená na skládce, mohla způsobovat mobilizaci

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	6 (50)

toxických prvků a jejich odnos ze skládky do půd a vod okolí. V květnu 2006 byly v recentních sedimentech potoka vně ohrazeného území skládky měřeny zvýšené koncentrace Fe, Cr, V a Ni. Koncentrace řady dalších kovů nebyly zvýšené. Nejbližší lidská sídla jsou od místa odběru potočních sedimentů vzdálena 500 m po proudu.

Chemismus povrchových a mělkých podzemních vod byl stanoven ve vzorcích odebraných v květnu 2006. Dva roky po překrytí povrchu opuštěné skládky plastovou fólií poklesly koncentrace jedovatých látek o 1 až 3 řády. Přesto voda v podzemní jínce v bezprostřední blízkosti skládky obsahovala 40 gramů sulfátu na litr (pH 2,7) a výtok z drenáže 200 m pod korunou skládky obsahoval 2 gramy sulfátu na litr (pH 3,1). Byly detekovány zvýšené koncentrace berylia a kobaltu (220 $\mu\text{g/l}$ Be v jínce a 19 $\mu\text{g/l}$ Be ve výtoku z drenáže; norma činí 1 $\mu\text{g/l}$ Be). V povrchových vodách a soukromých studních v blízkých vesnicích nebyly prokázány toxické koncentrace prvků uskladněných v tělese skládky. Obsah sulfátu nepřesahoval 100 mg L^{-1} .

V roce 2006 pokračoval monitoring izotopového složení síry ($\delta^{34}\text{S}$) a olova ($^{206}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$, $^{208}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$) v cca 15 mělkých vrtech situovaných 20 až 300 metrů od skládky. Pro izotopové analýzy S a Pb byla rovněž vzorkována voda v potoce 400 m po svahu, dešťové srážky, prameny a užitková voda ze studní na soukromých pozemcích.

V grafu $\delta^{34}\text{S} - 1/[\text{SO}_4]$ tvoří vody ze skládky Pozďátky a okolí směsné linie se čtyřmi koncovými členy mísení. Tyto koncové členy mísení jsou: kontaminované vody skládky ($\delta^{34}\text{S}$ 5,5-8,5 per mil; vysoké koncentrace SO_4), minerálka v obci Dobrá Voda (10,5 per mil) podkorunové srážky ve smrkovém porostu (4,0 per mil) a srážky na volné ploše (7,0 per mil; nízké koncentrace SO_4). Voda ve studních užívaných zahrádkáři se vyznačuje nižšími koncentracemi sulfátů a nižšími hodnotami $\delta^{34}\text{S}$ než vody ze skládky. Stojí však za zmínku, že v grafu $\delta^{34}\text{S} - 1/[\text{SO}_4]$ se data ze studní nacházejí na hranici oblasti tvořené shlukem analýz kontaminovaných vod ze skládky. Bude třeba vytvořit časovou řadu koncentračních a izotopových dat sulfátu. Tak bude možno v nejkratší možné době identifikovat přiblížení/průsak kontaminovaných vod do studní.

Poměry četnosti izotopů olova byla užity jako další nezávislý indikátor kontaminace. Systém $^{206}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$, $^{208}\text{Pb}/^{207}\text{Pb}$ v Pozďátkách vykazuje tři koncové členy mísení: srážky ($^{206}\text{Pb}/^{207}\text{Pb} = 1,15$), podložní hornina (1,38) a skládka (1,25). Systematika izotopů olova v mělkých vrtech ukazuje na odlišný směr proudění podzemních vod než nová geofyzikální data (elektrické profilování). V zóně přednostního proudění vody pod skládkou vykazují izotopy olova jiné složení než kontaminované vody.

Výzkum koloidních částic z uranového ložiska Stráž

Koloidní částice z vyluhovacích polí ložiska Stráž pod Ralskem potřebné pro studium jejich vlastností byly získány z dynamických neutralizačních experimentů. Ty jsou založeny na procesu neutralizace kyselých důlních vod alkalickými činidly. Původním předpokladem bylo srážení dobře definovaných minerálních fází, avšak v průběhu pokusu se zjistil vznik nedefinovaných koloidních částic. Ty byly následně využity pro další výzkum jejich chování v různých podmínkách. Po celou dobu neutralizačního experimentu byly souběžně sledovány změny chemismu reagujícího roztoku. Mikrochemickými zkouškami se podařilo zjistit chemické složení koloidů i jejich některé elektrochemické vlastnosti. Dále byl pozorován i proces stárnutí koloidních fází v roztocích. Studium chemického složení ukázalo, že koloidní fáze jsou tvořeny především směsí hydratovaných síranů a hydroxidů. V případě ekvibrace roztoku s atmosférou se mohou vyskytnout i karbonáty, zejména kalcit.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize			Strana (celkem)
	0	1	2 3	7 (50)

Kromě přímých experimentů byly pokusy modelovány volně dostupným geochemickým softwarem „PhreeqC for Windows“ a komerčním programem „Geochemist’s workbench 6.0“. Získané poznatky budou využity při souběžném vývoji softwaru reakčně-transportního modelu na Technické univerzitě v Liberci. Znalost chování koloidů může poskytnout cenné informace o významu těchto fází při sorpci či desorpci kontaminantů v horninovém prostředí.

Modelování acidifikace půd a vody a jejího vývoje

Odhad chemismu půd a půdních vod na lokalitě Načetín byl proveden biogeochemickým modelem MAGIC v porostech smrkové monokultury a přirozeného bukového lesa. Hlavním cílem bylo odhadnout vliv druhové skladby lesa na dlouhodobou acidifikaci a odhad budoucího vývoje při různých scénářích lesního managementu.

Nízká bazická saturace půd v roce 2003 (8,2% ve smrkovém lese a 6,4% v bukovém lese) byla důsledkem vysokého vymývání bazických kationtů z půd vlivem vysoké kyselé depozice. Měřená koncentrace hliníku v roce 2005 v půdních vodách byla $135 \mu\text{mol l}^{-1}$ a pH 4,32 ve smrkové monokultuře a $70 \mu\text{mol l}^{-1}$ a pH 4,4 v bukovém porostu. Z modelovaných odhadů vyplývá, že během vrcholu acidifikace na začátku 80tých let 20. století přispíval hliník k neutralizaci půdního roztoku ve smrkovém lese ze 70% a v bukovém lese z 55%. Také koncentrace síranů byla vyšší ve smrkovém lese ($525 \mu\text{eq l}^{-1}$), nežli v bukovém lese ($330 \mu\text{eq l}^{-1}$), jako následek vysoké suché depozice pod korunou jehličnanů. Vyplavování bazických kationtů bylo porovnatelné na obou stanovištích ($191 \mu\text{eq l}^{-1}$ ve smrku a $215 \mu\text{eq l}^{-1}$ v buku). Vysoké vyplavování bazických kationtů bylo zčásti mírněno vysokou depozicí těchto prvků ve smrkovém lese.

Modelové výsledky naznačují, že budoucí regenerace půdního prostředí bude výrazně příznivější v bukovém lese (vyšší pH, ANC, poměr Bc/Al a nižší koncentrace síranů a hliníku). Přesto bazická saturace v roce 2094 bude nižší v bukovém porostu (9,1%). Alternativní scénáře lesnického hospodaření budou mít za následek, v případě znovu zalesnění bukem, lepší půdní chemismus nežli zalesněním smrkem. Nejlepší regenerace půdního prostředí je odhadnuta pro alternativu ponechání holiny. Dosažené výsledky byly poslány k publikování do recenzovaného zahraničního periodika Ecological Modelling (Oulehle et al., 2006).

Návrh dalších prací

V letech 2005-2006 se výzkum sekce zaměřil zejména na sběr informací o geologickém prostředí z navazujících projektů, které zahrnovaly i technické a vrtné práce. V následující etapě bude dále pokračovat terénní měření, odběr vzorků pro chemické analýzy a vyhodnocení dostupných dat s cílem doplnit databázi GIS daty a podklady nezbytnými pro tvorbu, kalibraci a verifikaci matematických modelů proudění podzemních vod a transportu. Na rozšiřování a plnění databází bude sekce spolupracovat se sekcí Informatika.

Na lokalitě Potůčky-Podlesí v Krušných horách bude provedeno další karotážní měření ve vrtech PTP-3 a PTP-4a pro ověření rychlosti přirozeného proudění podzemních vod v horninovém prostředí s velmi nízkou propustností. Budou pokračovat také měsíční odběry a analýza vzorků podzemní vody z jednotlivých etáží vrtu PTP-5. Hydraulické vlastnosti vzorkovaných etáží vrtu PTP-5 budou otestovány periodickým čerpáním (odběrem vody ze vzorkovačů) v časovém horizontu několika dní za současného měření chemickofyzikálních vlastností odebírané podzemní vody. Data získaná v minulých letech na lokalitě Potůčky-

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	8 (50)

Podlesí a na melechovském masivu budou dále zpracovávána a vyhodnocována se zvláštním zřetelem na dynamiku procesů, objasnění příčin různých typů puklinové propustnosti a zjištění původu organického znečištění v hloubce žulového pně.

Bude modelována chemická interakce voda – hornina a její vliv na transport sodíku, vápníku a reprezentativního stopového prvku, nebo radionuklidu. Počítáme s modelováním transportu cesia.

Na lokalitě Pozďátky bude vyvrtán vrt do hloubky 40 m, kterým bude sledována hydrodynamická disperze Pb a Cr ze skládky puklinovým systémem v kompaktním durbachitu pod zvětralinovým pláštěm. Budou pokračovat izotopové analýzy síry (IRMS) a olova (TIMS) podzemních a povrchových vod z lokality Pozďátky a Dobrá Voda pro mezinárodní publikaci. Budou opakovaně provedeny odběry vod pro analýzu stopových prvků z 19 lokalit vzorkovaných v roce 2006. V nového vrtu, který byl odvrtán v roce 2006 do hloubky 56 m, bude ve vybraných časových horizontech sledováno složení izotopů síry a olova. Budou dokončeny analýzy koncentrací Pb na referenční lokalitě (20 vzorků, které metodou GF AAS vykázaly koncentrace pod mez detekce, tj, <1 ppm; rozklady již byly provedeny v ultrastopové laboratoři v CEREGE). Bude zahájen výzkum vlivu kontaminace půd v bezprostředním okolí skládky na dřeviny (metodika izotopové analýzy letokruhů smrků, v 1. fázi pro S). Budou provedeny analýzy podílu toxických kovů vázaných na Fe krusty a na amorfní hmotu vytékající z drenáže, který je dostupný pro rostliny (laboratorní loužení pevných vzorků a analýza výluhů). Budou dokončeny pilotní analýzy netradičních izotopů ve vodách (Fe, případně Cr). Hlavním cílem tohoto podúkolů je výzkum metod pro určení míry znečištění horninového prostředí a bisféry, stanovení směru možného šíření toxických látek a možnosti ohrožení blízkých zdrojů vod. Dalším úkolem je zpracování návrhu dalšího postupu při likvidaci skládky a zajištění ochrany prostředí v průběhu a po likvidaci.

V rámci vyluhovacího pole ve Stráži pod Ralskem bude pokračovat výzkum povrchových nábojů na stávajících, případně nových vzorcích koloidních částic. Pozornost bude soustředěna na kvalitativní a kvantitativní popis transportu této fáze porézním prostředím. Výsledky hydrogeochemického výzkumu roztoků ve vyluhovacích polích uranového ložiska Stráž budou připraveny pro publikaci.

V následující etapě výzkumu se v oblasti acidifikace půd zaměříme na výzkum efektu vápnění v dlouhodobé perspektivě. Smrkový porost bude v roce 2007 povápněn (3t dolomitického vápence na hektar). Bude provedena simulace modelem MAGIC a v dalších letech bude tato simulace konfrontována s naměřenými daty.

Jedním z významných úkolů celé sekce bude zpracování několika variant geochemických modelů popisujících chování látek rozpuštěných v podzemních vodách a jejich interakci s povrchy puklin. Úvodní modely budou popisovat především sorpci a desorpci látek. Pokročilé modely pak budou zahrnovat i kvalitativní vlastnosti chemických vazeb. Cílem výzkumu je shrnout veškeré informace o chování horninového prostředí, do kterého bude umístěno úložiště zvlášť nebezpečného odpadu.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	9 (50)

2 Prostorové modelování geologické stavby pánevních oblastí

Na řešení se podíleli: Bedřich Mlčoch, Veronika Štědrá, Jiří Konopásek, Eliška Žáčková, Zuzana Tesáříová

V roce 2006 byla převzata vrtná databáze ČGS-Geofondu z celkem 48 listů map 1 : 25000. Z této databáze jsou po listech vytvářeny ve speciální počítačové aplikaci soubory směřující k vytvoření 3D modelu geologických útvarů v oblasti české křídové pánve, konkrétně povrchu krystalinika a permokarbonu a báze kvartérního pokryvu v porovnání s digitálním modelem reliéfu DMR2. První ucelené datové soubory byly doplněny plošnými mapami geofyzikálních polí a výsledné soubory byly zpracovány do vizualizovaných dílčích prostorových modelů. Takto jsou předběžně zpracovány výseky pánve v oblasti Polabí, křídý Dlouhé meze a severní části ČKP. Pro okrajové části ČKP byly současně petrologicky charakterizovány litologicky kontrastní horniny kutnohorského krystalinika a za pomoci nově kalibrované metody vypočítány P-T podmínky ekvilibrace fylitů železnobrodského krystalinika. Z hmotné vrtné dokumentace Diama, s.p. byly vybrány vzorky hornin z podloží křídý na srovnávací petrologické a termobarometrické studium a připraveny ke speciálním analytickým pracím.

Návrh dalších prací

V roce 2007 bude, v závislosti na postupu zpracování, přebírána další série vrtných dat z ČGS-Geofondu. Zpracování dat bude v této etapě soustředěno do konkrétních lokalit, ve kterých bude možné využít získané informace pro modelový výzkum revitalizace krajiny po ukončení těžebních aktivit (např. severočeský hnědouhelný revír). Postupně budou propojeny nově zpracované celky vrtné databáze a kombinovány s geofyzikálními daty tak, aby mohly být sestaveny nové dílčí modely geologických útvarů, zejména krystalinika, permokarbonu a kvartéru. Dílčí modely paleoreliéfu krystalinika budou předběžně porovnány se stávajícími geologickými znalostmi o podloží křídové pánve. Nové výsledky petrologického zpracování podložních hornin budou interpretovány v kontextu dostupné strukturní, tektonické a látkové stavby modelovaných terénů. Verifikovaná část vrtné databáze bude předána zpět do archívu ČGS-Geofondu. Na tomto úkolu bude spolupracovat i sekce Informatiky. Příslušné části výsledků budou využity mimo jiné pro základní geologické mapy 1 : 25 000 listy 13-132 lysá n/L. a 13-141 Nymburk dokončované ČGS v roce 2007.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	10 (50)

II SEKCE SPECIÁLNÍ TECHNOLOGIE

Zodpovědný řešitel: Miroslav Černík

Sekce Speciální technologie pro životní prostředí se zaměřuje na výzkum použití nových sanačních technologií se zřetelem na technologie in-situ. Sekce zahrnuje práce ve 4 směrech, definovaných v samostatných výzkumných úkolech, a to:

ST-1: Výzkum fytořemediace a použití huminových látek pro sanace těžkých kovů

ST-2: Výzkum možností odstranění kontaminace za použití mikroorganismů

ST-3: Výzkum a vývoj použití oxidačních a reduktivních metod pro sanace organických látek a těžkých kovů

ST-4: Výzkum a vývoj použití nanovláken pro sanační praxi

Tyto čtyři výzkumné úkoly jsou zajištěny a koordinovány z pracoviště TUL s tím, že významnou částí se na jejich řešení podílejí všichni ostatní spoluřešitelé, jmenovitě VUAnCh (v řešení ST-1, ST-3), Aquatest (ST-2, ST-3), ČGS (ST-1, ST-3), UJEP (ST-1), UI AV (prezentace výsledků na www apod.). Vedle těchto institucí se na řešení dílčích problémů podílejí i další odborníci z jiných institucí.

1 Výzkum fytořemediace a použití huminových látek pro sanace těžkých kovů

Na řešení se podíleli: Josef Kozler, Jaromír Novák, Barbora Antošová, Pavel Kuráň, Vojtěch Váňa, Pavel Janoš, Sylvie Kříženecká, Lucie Herzogová

Jedním z hlavních směrů v rámci sekce sanační technologie (ST) je výzkum vlastností huminových látek (HS) s cílem jejich použití při sanaci těžkých kovů a jiných kontaminantů in-situ. Práce v rámci tohoto úkolu se v roce 2005 zaměřily na základní charakteristiku HS, jejich chemické vlastnosti a použitelnost v sanačních technologiích. Byly vybrány čtyři potenciální lokality, z nichž lze dlouhodobě a v dostatečném měřítku odebírat HS pro budoucí použití v sanačních technologiích. V roce 2006 bylo na tyto výsledky navázáno a práce byly rozděleny na 4 podúkoly se společným cílem přípravy prvních pilotních aplikací na vybraných lokalitách k ověření metodiky. Tyto podúkoly lze charakterizovat:

1. Podrobné studium chemických a strukturních vlastností vybraných vzorků HS
2. Studium biologické aktivity HS
3. Studium fytořemediačních procesů
4. Určení iontově výměnných a sorpčních vlastností HS

Cíl

I přes společný cíl přípravy ověřovacích pilotních experimentů měly jednotlivé podúkoly své vlastní dílčí cíle a to z důvodů lepší koordinace prací a ověření dosažení výsledků. Podrobné cíle jsou uvedeny ve vlastní zprávě, nejdůležitější cíle podúkolů jsou následující:

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	11 (50)

1. Příprava dekontaminačních substrátů pro pilotní aplikace opírající se o stanovení chemického složení a strukturních parametrů HS a studium korelací mezi strukturními parametry HS a jejich sorpční schopností pro vybrané polutanty a biologickou aktivitou.
2. Pokračování a prohloubení nádobových pokusů s oxyhumolitickým uhlím, především rozšířením metody měření biologické aktivity výběrem dalších vhodných rostlinných druhů.
3. Založení rozsáhlých vegetačních pokusů (pilotní aplikace) a provedení termínových odběrů vzorků půd a rostlin.
4. Popis vazby těžkých kovů, případně jiných polutantů na komplex huminových látek s jílovými minerály za účelem návrhu pilotního experimentu pro sorpci kationtů těžkých kovů, případně dalších polutantů (např. Cr⁶) na vybraných sorbentech na bázi HS.

Metodika prací

Na rozdíl od roku 2005, kdy základní metodikou prací bylo vypracování vlastních metodik studia HS a jejich ověření, proběhly v roce 2006 důkladné laboratorní experimenty a přípravné práce pro zahájení pilotních aplikací. V jenom případě a to podúkolů Studium fytoremediačních procesů došlo již k zahájení těchto experimentů a jejich sledování bude probíhat i v letech 2007 - 2008.

Pro **charakterizaci huminových látek** byl vybrán a ověřen soubor analytických metod. Jsou to tzv. metody základní: stanovení vlhkosti, popela, loužitelných HS, obsahu HS podle Ťurina, rozlišení huminových kyselin (HA) a fulvokyselin (FA), celkové acidity a karboxylových funkčních skupin, složení anorganického podílu, poměru E4/E6 a elementární analýzy.

Nově byly pro charakterizaci HS zavedeny tyto metody:

- Stanovení celkového počtu OH skupin.
- Měření acidobazických titračních křivek.
- Měření distribuce molekulových hmotností.

Z hlediska popisu **biologické aktivity** byla u klíčících semen vybraných rostlin měřena rychlost růstu zárodečného kořene, který roste v živném roztoku za přítomnosti HS. Do zkoušek byly zařazeny rostliny jednoděložné (pšenice, ječmen, kukuřice) a dvouděložné (tykev, cuketa, okurka, hrách, fazol, slunečnice). Byla použita metoda klíčících semen rostlin kukuřice seté, při které byly měřeny délky kořene. Výsledky měření byly hodnoceny t-testem.

V rámci experimentů byla také sledována možnost přeměny huminových látek obsažených v oxyhumolitickém uhlí na biologicky aktivní HS. Z tohoto důvodu byly založeny nádobové pokusy s dvěma odlišnými půdními typy. V každém z uvedených půdních typů jsou vedle kontrolních nádob nádoby se stupňovanými dávkami oxyhumolitického uhlí. Pokus je dlouhodobý (4 roky).

Základní metodou studia **fytofarmacie** je vypracování systému parcelových polních experimentů, které dokáží zajistit potřebnou kombinatoriku jednotlivých variant v navrženém rozsahu řešení a monitoring procesů vedoucích k případné remediační revitalizaci antropogenně znečištěné oblasti vybranými anorganickými látkami. Jako vzorky byly použity energetické rostliny - *Silphium perfoliatum*, *Salix viminalis*, *Phalaris arundinacea*, *Coronilla varia* a organické komponenty - typový průmyslový kompost, lignocelulózoový substrát,

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	12 (50)

oxyhumolitické uhlí s Ca a oxidované oxyhumolitické uhlí s Ca. Vlastní realizace přípravy a založení polních experimentů byla dána souborem na sebe navazujících pracovních operací agrotechnického charakteru – příprava pozemku, vytyčení jednotlivých parcel, aplikace a zapravení kontaminantů, aplikace a zapravení komponent dekontaminačních substrátů, odběr výsadbového materiálu vybraných rostlin, setí a výsadba zájmových energetických rostlin - které zajistily úspěšné dosažení požadovaného výsledku.

Výsledky

Základem pro aplikaci metody je získání a charakterizace dostatečných zdrojů HS. Inventarizace zdrojů huminových látek byla zahájena již v roce 2005. Výsledky prací v prvním roce řešení ukázaly, že průzkum ložisek bude třeba provádět průběžně po celou dobu jeho trvání. Je to proto, že ložiska nejsou homogenní a při pokračování těžby, případně skrývky, jsou z různých míst získávány suroviny odlišné kvality.

Pro využívání huminových látek v sanačních technologiích jsou k dispozici tato ložiska:

- *Důl Václav u Duchcova*: Majitelem je SD - Humatex, a. s., Bílina;
- *Lomy Jiří, Lomnice a Družba*: Majitelem je Sokolovská uhelná, a. s.;
- *Výsypka bývalého lomu Vršany* (Mostecko): Majitelem je Humeco, a. s., Most-Kopisty;
- *Důl Mír Mikulčice*: Majitelem je Lignit Hodonín, s. r. o.

Podrobnější charakteristika chemických a strukturních vlastností vybraných vzorků HS z jednotlivých zdrojů ukazuje základní rozdíly v použití jednotlivých zdrojů s tím, že zásoby jsou min. na 30 let při odhadované roční spotřebě několika tun HS z každé z lokalit. Další možností je umělá příprava HS oxidací tzv. oxyhumolitického uhlí, tj. uhlí s nízkým obsahem loužitelných HS. Oxidací kyselinou dusičnou lze výrazně zvýšit obsah loužitelných HS. Z takto oxidovaného materiálu byl připraven roztok humátu draselného, který vykazoval vysokou biologickou aktivitu. Pro agrochemické testování bylo připraveno několik dekontaminačních substrátů a to z oxyhumolitů z dolu Václav u Duchcova a výsypky lomu Vršany, z oxyhumolitického uhlí z lomu Družba u Sokolova a oxidovaného oxyhumolitického uhlí.

Pro testování **biologické aktivity** byl dokončen výběr rostlin pro testování huminových látek na jejich klíčících semenech. Do testu byly zahrnuty jednoděložné (pšenice, ječmen, kukuřice) a dvouděložné (tykev, cuketa, okurka, hrách, fazol, slunečnice) rostliny. Všechny zkoušené rostliny vykazovaly kladnou reakci na přítomnost testovacích HS. Intenzita reakce závisela na druhu rostliny a pohybovala se v rozpětí od 35 % do 956 % kontroly. Kořeny zkoušených rostlin vykazovaly podstatně silnější reakci na přítomnost HS než nadzemní části rostlin.

Biologická aktivita vzorků HS připravených v rámci prvního podúkolu byla velmi proměnlivá a pohybovala se v rozpětí od 33 % (inhibice) až do 200 % (stimulace) vztaženo ke kontrole v závislosti na původu a způsobu přípravy vzorku. Výsledky naznačují, že faktorem, který biologickou aktivitu ovlivňuje, je složení vzorku HS, které lze vyjádřit jako dosud nedefinovaný strukturní rozdíl nebo nežádoucí příměs ve vzorcích.

Dlouhodobé nádobové testy lze v prvním roce vyhodnotit jen velmi omezeně. Nádoby byly osety kukuřicí, po sklizni byla stanovena hmotnost sušiny a provedeny analýzy odebraných vzorků. Tyto výsledky ukazují, že hmotnost sušiny a výsledky analýz nekorespondují se stupňovanými dávkami uhlí. Pokles koncentrace prvku v sušině

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	13 (50)

v nádobách s oxyhumolitickým uhlím odpovídá zředovacímu efektu nárůstu hmotnosti sušiny.

V rámci studia fytořediace byly zajištěny a realizovány práce spojené s vedením založených polních pokusů, které zahrnovaly zvláště operace mechanického a chemického charakteru vedoucí k zajištění zdárného růstu a vývoje porostů energetických rostlin, jejich druhové čistoty (především vyloučení přítomnosti plevelných druhů) a ochranu proti působení případných patogenních organismů, což bylo dalším cílem řešení v rámci aktivit roku 2006. Také bylo vypracováno odběrové schéma pro odběr půdních a rostlinných vzorků a zároveň proveden primární odběr a analýza půdních vzorků z jednotlivých variant opakovaní pokusných parcel.

V rámci podúkolů iontově *výměnné a sorpční vlastnosti vybraných sorbentů na bázi HS* bylo zjištěno, že oxyhumolity jsou schopny zachycovat účinně kationty vícevalentních kovů (zvl. těžké kovy) a mohou být využity pro čištění určitých typů odpadních vod. Dále bylo prokázáno, že některé sorbenty, např. tzv. humát železa vznikající jako odpad při výrobě alkalických humátů, jsou schopny redukovat toxický šestimocný chrom a za určitých podmínek jej pevně vázat (imobilizovat) ve své matici, což může být opět využito při zpracování určitých typů průmyslových odpadních vod či použitých lázní.

Návrh dalších prací

V rámci základní charakteristiky HS bude pokračováno v odběrech vzorků z ložisek severočeské a západočeské hnědouhelné pánve a z lignitového dolu z jižní Moravy s cílem sledování stability složení a vlastností surovin.

Studium biologické aktivity HS bude pokračovat v nádobových pokusech pro sledování možnosti přeměny HS obsažených v oxyhumolitickém uhlí na biologicky aktivní HS a měření biologické aktivity vzorků HS na vzorcích vyšších rostlin a mikroorganismech.

V rámci projektu fytořediace půd budou významnou součástí prací v roce 2007 (tak jako v roce 2006 a v letech následujících) rozsáhlé termínové odběry vzorků půd a rostlin, jejich zpracování, analýza a vyhodnocení výsledků analýz jednotlivých pokusných variant včetně. Tato výzkumná aktivita je rozhodující pro zajišťování fytoředičního monitoringu v rámci projektu a získané výsledky budou hlavním kritériem pro závěrečné doporučení využití fytoředičních aplikací v praxi.

V rámci studia iontovýměnných vlastností HS bude pokračováno ve studiu sorpce kationtů kovů (chrom, arzén) na širší škále neupravených i modifikovaných (aktivovaných) oxyhumolitů, případně i jiných druhů hnědého uhlí s cílem vytipovat vhodné materiály pro průmyslové aplikace.

2 Výzkum možnosti odstranění kontaminace za použití mikroorganismů

Na řešení se podíleli: Vladimír Jirků a kolektiv, Pavel Dusílek a kolektiv, Tomáš Lederer, Ondřej Kliner, Libor Šustr, Ondřej Nol, Marta Valentová

Tento úkol řeší jednak problematiku použití mikroorganismů pro odstranění kontaminace a jednak do této problematiky zapadá i odstranění mikrobiální kontaminace povrchových vod (sinice). Vzhledem k tomu, že vymezení jednotlivých úkolů je pouze administrativní

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize				Strana (celkem)
	0	1	2	3	14 (50)

z důvodů jejich lepší kontroly a plánování, prolíná se navzájem problematika jednotlivých úkolů. Proto bude mikrobiálně podpořená reduktivní dehalogenace prezentována v rámci úkolu ST-3 (Oxidačně redukční metody), i když je to nesporně metoda odstranění kontaminace za použití mikroorganismů. Tyto mikroorganismy však nejsou do prostředí uměle přidávány, ale vytvářejí se na základě působení jiné látky a průběh vlastní reakce je oxidačně redukční děj. Podobně výzkum použití nanovláken jako nosičů biologických materiálů pro dekontaminaci vod je zařazen v rámci úkolu ST-4 (Nanovlákná), protože předmětem výzkumu nejsou mikroorganismy, ale nanovlákná jako nosiče známých kultur mikroorganismů.

Cíl

Cílem byl výzkum funkčních skupin buněčných povrchů pro vazbu iontů těžkých kovů, dostupnost utilizovaného substrátu, sorpci a povrchový depozit iontu těžkého kovu, aktuální dostupnost dalších nutrientů a celkovou rezistenci ke všem přítomným stresorům. Výzkum těchto skupin je důležitý, protože jsou to komponenty určující aktivitu bioremediativní funkce jednobuněčných degradérů a biosorbentů. Výzkum byl realizován ve spolupráci s prof. Jirků (VŠCHT).

Cílem výzkumu odstranění znečištění povrchových vod sinicemi bylo pilotní ověření několika metod *in situ* popř. *on site* (ve sloupci povrchové vody, popřípadě v pórové vodě sedimentů) na sanaci povrchové vody umožňující rekreační využívání nádrží ke koupání a studium možností využití matematického modelování pro koncepční pochopení a popis současně probíhajících eutrofizačních procesů v těchto nádržích.

Metoda prací

Experimentální program VŠCHT v roce 2006 byl zaměřen na komplexní, avšak vstupní charakteristiku fenotypu produkce povrchově vázané polysacharidové a bílkovinné složky (EPS) v buněčných populacích nemyceliálních (kvasinkových) a myceliálních (vláknitých hub), a to taxonů s optimální citlivostí k vlivu vybraných iontů těžkých kovů, potenciálně použitelných v procesu jejich biosorpce.

Postup prací v rámci studia odstranění sinic je možné shrnout do několika na sebe navazujících kroků:

- úvodní monitoring (Máchovo jezero a Dubice),
- zajištění testovacích přípravků a jejich laboratorní rozbor,
- usazení čtyř kusů vsádek do litorální části Máchova jezera,
- výstavba a umístění šesti kusů silnostěnných plexi trubic na nádrži v Dubici,
- příprava a zahájení laboratorních orientačních flokulačních zkoušek,
- průběžný monitoring kvality vody a sedimentů v testovacích vsádkách a hlavních profilech nádrže při současném proměřování fyzikálně-chemických parametrů (pH, teplota, Eh, rozpuštěný kyslík) po aplikaci přípravků a jejich návaznost na plánované matematické modelování.

Výsledky

Mimobuněčné uvolňování a povrchová fixace komplexu polysacharidové a bílkovinné složky (vázané EPS – exopolymeric substance) je klíčovým faktorem ovlivňujícím stav vnější části

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	15 (50)

buněčného povrchu. Změny v této části komplexu povrchových struktur obecně ovlivňují jednak funkci a vlastnosti buněčné stěny, jednak určují aktuální stav buněčného mikroprostředí. Z hlediska základních funkcí buněčného povrchu je tato aditivní složka potenciální difúzní bariérou, prostředím ovlivňujícím pohyb iontů i malých a velkých molekul, a také prostředím biochemických procesů i fyzikálně chemických interakcí, včetně hydratace buněčného povrchu.

V kontextu technologické aplikace mikrobiálních degradérů xenobiotik a biosorbentů iontů těžkých kovů, volná i vázaná exopolymerní složka vždy (v určitém rozsahu) reguluje buněčnou dostupnost utilizovaného substrátu, sorpci a povrchový depozit iontu těžkého kovu, aktuální dostupnost dalších nutrientů a celkovou rezistenci ke všem přítomným stresorům. Jinými slovy, uvedená složka je zároveň komponentem určujícím aktivitu bioremediativní funkce jednobuněčných degradérů a biosorbentů. V případě technologií, které nahrazují použití suspenzních populací degradérů / sorbentů, technologickou aplikací jejich přirozených biofilmů, polymerní složka (kromě uvedeného) určuje primární kontakt buňky s povrchem nosiče, a následně i integritu vzniklého biofilmu.

Experimentální studium interference těžkých kovů s růstovou a reprodukční aktivitou nemyceliárních i myceliárních taxonů prokázalo, že EPS má přibližně stejnou kapacitu deponovat oba kovy. V této souvislosti získané výsledky naznačují, že glukán / mannanový komplex EPS, produkováný v přítomnosti kovu taxony nemyceliálními (kvasinkovými), obsahuje vyšší hladinu mannosy, ve srovnání s EPS taxonů myceliálních. Přítomnost vyšší koncentrace kovu v kultivačním prostředí určuje v případě taxonů nemyceliálních jejich vyšší deposit v struktuře EPS. Proto byla dále studována produkce EPS v různém prostředí (pH, vliv iontové síly, iontů, zdrojů C a N). Byly nalezeny optimální podmínky vzniku EPS a stanoveny její vlastnosti pro optimální záchyt těžkých kovů. Na základě těchto experimentů bude možno optimalizovat vznik EPS pro záchyt těžkých kovů z roztoků při sanacích kontaminovaných vod.

Výsledky v oblasti odstranění sinic prokázaly oprávněnost aplikace testovaných přípravků PAX-18 a Phoslock®, popř. dalších přípravků pro zlepšení kvality povrchové vody k rekreačním účelům (koupání), což v případě Máchova jezera je indikováno i současně realizovanou celoplošnou aplikací přípravku PAX-18. Konečné závěry je možné učinit až s ohledem na výsledky monitoringu, který proběhl po odevzdání této zprávy, ale již dnes je zřejmé, že přes jejich relativně vysokou účinnost v laboratorních popř. terénních pilotních „pytlových pokusech“ aplikovatelnost těchto přípravků má i svá omezení, jak je patrné z dosavadních výsledků monitoringu na druhé testovací lokalitě – nádrži Dubice. I přes opakovanou plošnou aplikaci PAX-18 v prostoru koupaliště se totiž nepodařilo snížit obsah sinic na hygienicky přijatelnou úroveň. Z uvedeného mimo jiné vyplývá, že dosavadní výsledky monitoringu, včetně terénních měření na nádrži Máchovo jezero, potvrzují názory předních odborníků, že bude třeba celou problematiku do budoucna řešit z různých hledisek a tedy mnohem komplexněji s cílem navození podmínek nádrže jezerního typu (je vztaženo na Máchovo jezero, ale platí obecně i na jiných významných nádržích - například otázka potenciálu využití podzemních vod, zvýšení účinnosti přednádrže/mokřadu, stabilizace hladiny vody v nádrži, odstranění anaerobních sedimentů a následné technicko-ekonomické efektivní nakládání s nimi). Jak provedené experimenty potvrdily, v případě nádrže Dubice je třeba se co nejdříve zabývat mocností a typy sedimentů a upřesněním možností eliminace externí zátěže. Pro realizaci těchto úkolů je nezbytné zajistit ještě větší součinnost s dotčenými orgány a organizacemi a jejich odpovídající financování.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	16 (50)

Dosavadní výsledky matematického modelování programem WASP prokázaly poměrně dobrou shodu s prováděným hydrochemickým a hydrobiologickým monitoringem. Do budoucna se ukazuje jeho využitelnost např. pro odhad účinnosti sanačního zásahu na modelované nádrži i simulaci očekávaných podmínek. Neméně významné je i koncepční pojetí modelu, ze kterého vyplynula potřeba revize hydrodynamických údajů a jejich průběžné doplňování.

Návrh dalších prací

V rámci prací na EPS bude pokračováno v testování technologie při jednoduché pilotní aplikaci s cílem dosažení optimálního zachytu těžkých kovů (Ni a Cd) do EPS struktury a dostatečně účinného odstranění ze vzorků kontaminovaných vod.

V rámci odstranění sinic předpokládáme pokračování experimentů na lokalitě Máchovo jezero (pokračující monitoring, matematické modelování, provedení zkoušky flotace, doplnění výsledků z výzkumu o další získané informace, přemístit testovací zařízení pro „pytlkové pokusy“ z nádrže Dubice na vhodnou testovací plochu pro nádrž Máchovo jezero, připravit a zahájit novou etapu pilotních experimentů v laboratoři a vsádkách na Máchově jezere se zaměřením na úlohu zátěže sedimentů a možnosti jejich řešení on site, vybudování monitorovacího systému a zahájení pravidelného monitoringu. Vedle této lokality se práce zaměří i na jinou vhodnou lokalitu (např. nádrž Skalka u Chebu).

3 Výzkum a vývoj použití oxidačních a reduktivních metod pro sanace organických látek a těžkých kovů

Na řešení se podíleli: Miroslav Černík a kolektiv, Alena Rodová

Cílem úkolu je posouzení použitelnosti jednotlivých metod odstranění kontaminace podzemních vod a horninového prostředí založených na působení oxidačních nebo reduktivních činidel. Hlavním směrem ke splnění tohoto cíle je provedení pilotních ověření vybraných metod na konkrétních kontaminovaných lokalitách. Před vlastní pilotní aplikací je nutné provést soubor laboratorních zkoušek s cílem určit použitelnost metody pro daný typ kontaminace, dané složení podzemní vody a vlastnosti horninového prostředí. S laboratorními a pilotními experimenty bylo započato již v roce 2005 s tím, že v experimentech bylo intenzivně pokračováno v roce 2006. Také došlo k dokončení či vyhodnocení pilotních aplikací započatých v roce 2005.

Metodika prací

Jak vyplývá z cíle úkolu metodika řešení se opírá o provedení laboratorních a terénních pilotních zkoušek a jejich zobecnění. Bez ohledu na to, zda je použitým činidlem oxidant či redukující látka, byly pro jednotlivé metody provedeny následující kroky:

- vytvoření standardních metodických postupů získávání podstatných parametrů pro dimenzování sanačních prací a provoz sanací,
- studium účinnosti (a zejména mezi účinnosti činidel při odbourávání kontaminantů),
- studium vlivu různých složek horninového prostředí.

Obecně jsou laboratorní zkoušky proveditelnosti prováděny v několika krocích:

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	17 (50)

1. orientační zkouška proveditelnosti,
2. určení limitujících faktorů a spotřeby činidel,
3. určení kinetiky reakcí.

Pilotní aplikace jsou pak specifické pro jednotlivé metody a použitá činidla a i jejich vyhodnocení nemá jednotnou metodiku.

Z hlediska použitých činidel a kontaminantů se činnost centra zaměřila na:

- oxidaci chlorovaných etenů manganistanem draselným,
- mikrobiálně podpořenou reduktivní dehalogenaci,
- použití elementárního nanoželeza pro sanaci chlorovaných etenů a těžkých kovů.

Výsledky

Projekt oxidačně redukčních dějů se zaměřil na využití manganistanu draselného, kyseliny mléčné a nulmocného nanoželeza k odbourávání chlorovaných uhlovodíků z horninového prostředí a podzemní vody. Metody jsou založeny na oxidaci kontaminantu (manganistan), biologicky podpořené redukci (kys. mléčná) a přímé chemické redukci (nanoželezo). Ve všech případech probíhaly laboratorní experimenty a pilotní ověření technologií in-situ.

V případě použití technologie ISCO s využitím KMnO_4 je pro relativní jednoduchost sanační procedury výzkumná činnost nejdále v porovnání s ostatními činidly. Na lokalitě Kuřívody začala v tomto roce plná sanace a bude proto dále sledována s cílem získat nadstandardní data o výsledcích metody, její účinnosti a vlivu na životní prostředí. Pro poměrně omezenou účinnost manganistanu na některé další typy kontaminantů (BTEX) je aktuálně a pro následující období výzkumná činnost vedena právě tímto směrem. Rozpracovávají jsou, prozatím v laboratorním měřítku metodiky provádění zkoušek s dalšími oxidačními činidly (persulfát, fentonovo činidlo, perkarbonát).

Mikrobiálně podpořená dehalogenace byla v pilotním měřítku aplikována na dvou, po geologické stránce zcela odlišných lokalitách, na lokalitě Kuřívody a lokalitě Piešťany. V obou případech se metoda mikrobiálně podpořené reduktivní dechlorace ukazuje být efektivní sanační technologií. Ve všech případech bylo zkoušeno ovlivnění průběhu dechlorace změnami zasakované koncentrace substrátu. Terénní zkoušky poukázaly na minimální účinnou koncentraci substrátu. Na druhou stranu se zvyšováním koncentrace substrátu a vzhledem k poměrně dlouhodobému procesu dechlorace nebyl prokázán negativní vliv zvýšených koncentrací substrátu na průběh dechlorace. Terénní pilotní zkoušky ukázaly, že během procesu dechlorace dochází k postupnému odbourávání jednotlivých CIU, čímž se ve směsi chlorovaných uhlovodíků objevují postupně méně-chlorované látky na úkor více-chlorovaných sloučenin. Terénní zkoušky potvrzují, že po určité období je třeba počítat se zvýšenou přítomností 1,2-cis DCE, zatímco všechny ostatní chlorované látky se pohybují při úrovních mezi detekovatelností. Při úbytku redukční síly horninového prostředí se v závěrečné fázi aplikace (po spotřebování převažující části substrátu) může začít objevovat toxický vinylchlorid. Během procesu dechlorace mohou být ve stopových množstvích detekovány i další chlorované etheny a ethany.

Další zkoumanou metodou je použití nanoželeza pro sanaci chlorovaných látek a těžkých kovů. Práce probíhaly jednak na pracovišti TUL, jednak VUANCh. Pilotními lokalitami byly vedle lokality Kuřívody, i lokalita Piešťany a Křivoklát (kontaminace

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	18 (50)

šestimocných chromem). Laboratorní experimenty byly provedeny i na vzorcích z jiných lokalit, z nichž nejdůležitější je lokalita u Berlína (SRN) a Pontypool (GB). Na těchto lokalitách by mohlo v příštím roce dojít k experimentálnímu pilotnímu ověření metody.

Výsledky laboratorních experimentů ukazují praktickou použitelnost metody pro sanace, určují rychlosti reakcí a nutné minimální a optimální koncentrace nanočástic pro sanační zásah. Metoda spolehlivě funguje na sanaci chlorovaných etenů, uranu i chromu. Ukazuje se, že ve většině případů je reakce mezi kontaminantem a nanoželezem poměrně pomalá a nutná doba pro prokázání účinné reakce je v řádu několika týdnů. Pilotní aplikace ukázaly velmi dobré výsledky a to na všech studovaných lokalitách i pro oba typy kontaminace (chlorované eteny a šestimocný chrom).

Návrh dalších prací

Z hlediska oxidačních metod byl proveden důkladný výzkum použití manganistanu draselného pro sanaci chlorovaných etenů. Tato metodika je již zvládnutá, a proto bude její další výzkum omezen na monitoring sanované lokality v Kuřívodech. O to aktuálnější se v současnosti stává problematika použití i jiných oxidačních činidel (fentonovo činidlo, persulfát apod.). První laboratorní experimenty s těmito činidly byly provedeny, ale s důkladnějším studiem bylo započato až v závěru roku 2006 s tím, že experimenty jsou zaměřeny na pilotní aplikaci pro sanaci látek BTEX na lokalitě Chemopetrol Litvínov. V experimentech bude pokračováno.

Další cestou je zkoumání kompatibility sanační technologie ISCO s dalšími sanačními postupy (především reduktivní dehalogenace). Reduktivní dehalogenace je šetrnějším avšak pomalejším sanačním postupem. Vzhledem k nižší finanční nákladnosti této metody je reduktivní dechlorace používána pro dočištění zbytkového znečištění po intenzivním sanačním zásahu. Toto téma nebylo v roce 2006 podrobněji rozpracováno. Vzhledem k relativně malým poznatkům v tomto směru bude třeba v následujícím období získat více informací zejména o vlivu kombinace metod na spotřebu chemikálií a na mobilitu stopových toxických prvků v horninovém prostředí.

Z hlediska reduktivních metod budou pokračovat laboratorní experimenty s elementárním nanoželezem s tím, že množina kontaminantů se rozšíří o arzén, PCB, uran a další látky. Také bude studována možnost kombinace mikrobiálně podpořené dehalogenace a použití nanoželeza. Předpokládáme také další pilotní aplikace a vyhodnocení probíhajících in-situ experimentů.

4 Výzkum a vývoj použití nanovláken pro sanační praxi

Na řešení se podíleli: Oldřich Jirsák, Jiří Mosinger, Jiří Chaloupek, Rudolf Novák, Lenka Martinová, Jakub Hruža, David Lukáš

Cíl

Nanovlákná bude pravděpodobně možno využít pro sanační technologie několika způsoby. Cílem této úvodní etapy výzkumu bylo ověřování některých způsobů využití nanovláken, které se na základě dosavadních zkušeností jeví jako zajímavé. Na základě výsledků budou naplánovány podrobnější kroky k vývoji nejzajímavějších aplikací.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	19 (50)

Metodika prací

Metodika prací se opírá o přípravu různých vzorků nanovláken, která jsou pak v laboratořích podrobena výzkumu z hlediska použití v sanačních technologiích. Základem laboratorních experimentů jsou vsádkové a kolonové experimenty (v otevřeném i uzavřeném uspořádání). Vzhledem k tomu, že příprava cílených nanomateriálů i experimentální uspořádání experimentů vyžadují nestandardní postupy, byly v roce 2006 provedeny pouze první orientační experimenty, které měly za cíl ověřit základní metodické postupy výzkumu použití nanovláken a to jako nosičů biologického materiálu (bioremediace), pokovených nanovláken jako katalyzátorů pro působení elementárního nanoželeza (kombinace nanovláken a nanoželeza), a jako nosičů fotocitlivých látek.

Výsledky

Jedním z rozpracovaných způsobů je příprava vláken obsahujících ve hmotě fotosenzitizery. Fotosenzitizery jsou organické chemické sloučeniny schopné absorbovat viditelné světlo a předávat absorbovanou energii atmosferickému kyslíku v okolí takovým způsobem, že je kyslík převeden na vyšší energetickou formu, takzvaný singletový kyslík. Singletový kyslík má krátkou dobu života a chová se vůči okolí jako mimořádně silné okysličovadlo. Například je schopen hubit bakterie. Umístění fotosenzitizérů ve vláknech s velkým měrným povrchem a malými rozměry je činí dobře přístupnými světlu a mimořádně účinnými.

Druhou variantou použití nanovláken je jejich plasmové pokovení materiály vykazujícími katalytické schopnosti v reakcích vedoucích k odbourávání organických sloučenin. Byly tak připraveny materiály s nánosem mědi, niklu a paladia. Kov na povrchu nanovláken je rozprostřen na velkém a přístupném povrchu, což dává předpoklad vysoké katalytické účinnosti při nepatrných množstvích.

Nanovláken lze využít k tvorbě medií, na nichž lze pěstovat živočišné buňky. To vedlo k myšlence využití takových substrátů k pěstování a ukotvení bakterií účinných v sanačních procesech. Na základě zkušeností z lékařských výzkumů byly připraveny nanovláčenné vrstvy z různých typů polymerů: polyvinylalkohol, polyamid 6, polyuretan a poly-(etoxyetyl metakrylátakrylát).

V oblasti filtrace lze nanovláčenné vrstvy kombinovat s různými filtračními materiály. Důsledkem je zvýšení filtrační odlučivosti a také zlepšení možnosti opakovaného čištění filtrů cestou protiproudního odstraňování filtračního koláče. Právě tento účinek byl zkoumán.

Postupy přípravy polymerních nanovláken elektrostatickým zvlákňováním jsou poměrně málo prostudovány a fyzikální podstata příslušných procesů je jen postupně odhalována. To činí zpracování některých polymerů obtížným a záměrné ovlivňování vlastností produktů omezeným. Z toho důvodu je součástí všech výzkumných prací studium fyziky elektrostatického zvlákňování roztoků polymerů. Je proto i součástí této práce.

Návrh dalších prací

V dalším roce předpokládáme následující směry výzkumu:

- laboratorní výzkum použití fotosenzitizérů pro odstranění chlorovaných uhlovodíků a BTEX látek z kontaminovaných vod,
- laboratorní výzkum použití nanovláčenných pokovených filtrů jako katalyzátorů reakcí (odstranění uranu a chlorovaných uhlovodíků za pomoci nanoželeza),

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	20 (50)



- experimenty s růstem buněčných populací na nanovlákněných strukturách pro odstranění kontaminantů z vod biodegradacemi, studium uspořádání experimentu a návrh pilotní aplikace,
- příprava materiálů, které nebudou podléhat změnám ve vodním prostředí (odlupování nanovrstvy) a budou dlouhodobě stabilní pro navržené technologie.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	21 (50)

III SEKCE MODELOVÁNÍ

Zodpovědný řešitel: Jan Šembera

Sekce Modelování se zaměřuje na výzkum použití moderních numerických metod, jejich počítačových implementací a uplatnění při modelování scénářů vývoje transportu kontaminace ve zvolených lokalitách. Mezi úkoly této sekce je i výzkum metod pro stanovení rizik jednotlivých postupů včetně metod pro stanovení ekonomických nákladů sanace a zdravotních následků. Sekce zahrnuje práce v šesti směrech, definovaných v samostatných výzkumných úkolech, a to:

M-1: Výzkum metod kalibrace a verifikace modelů

M-2: Výzkum a implementace modelů proudění podzemních vod

M-3: Výzkum a implementace modelů transportu látek v horninovém prostředí

M-4: Výzkum metod pro řešení rozsáhlých řídkých systémů lineárních rovnic

M-5: Vývoj preprocesorů a postprocesorů pro přípravu dat a grafické výstupy

M-6: Výzkum metod a nástrojů pro hodnocení následků nebezpečných událostí

Těchto šest výzkumných úkolů je zajištěno a koordinováno z pracoviště TUL s tím, že na některých se podílejí i odborníci z jiných institucí formou dohod o pracovní činnosti.

1 Výzkum metod kalibrace a verifikace modelů

Na řešení se podíleli: Jan Šembera a kolektiv

Zadání a cíl výzkumných prací

Hlavním cílem studia metod kalibrace bylo prověření možností stanovení algoritmického postupu při nastavování volitelných parametrů úloh pro dosažení shody výsledků modelu s výsledky měření. Přitom nešlo v tomto zadání o obecnou formulaci úlohy kalibrace, ale o praktická řešení reálných úloh. Jednotlivé úlohy byly však natolik rozdílné, že se ukázalo hledání obecného postupu jako nereálné především pro málo definované horninové struktury.

Postup prací – metodika

Metodika postupu kalibrace byla značně odlišná pro jednotlivé řešené úlohy a velmi závislá na množství dostupných dat. Hydrogeologické úlohy byly řešeny ve čtyřech lokalitách, vždy se značnými rozdíly v rozsahu vstupních dat a množství kontrolních měření. Velmi podrobně byly popsány úlohy v lokalitě Strážského bloku. V této lokalitě jsou pro tvorbu modelů na rozloze asi 25 km² k dispozici výsledky měření z několika tisíc (celkem asi 14 tisíc) vrtů. Na základě informací z vrtů byla poměrně velmi přesně postavena struktura sedimentovaných vrstev. Ve vrtech byly v průběhu těžby i následné etapy sanace ve vrtech měřeny výšky hladiny podzemní vody. Několik set vrtů bylo jádrových a u nich byly studovány vlastnosti hydraulické propustnosti, chemického složení. Pro modelování transportu látek v takto detailně prozkoumaných oblastech s množstvím časových řad vývoje hladin ve vrtech a množstvím chemických analýz bude možné využít software pro kalibraci.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	22 (50)

Právě pro automatickou kalibraci nastavení chemických parametrů byl použit volně dostupný software UCODE, který byl právě pro modelování podzemních procesů vyvinut pracovníky U. S. Geological Survey. Výsledky této kalibrace jsou shrnuty v metodické zprávě Lenky Čížkové a prokázaly úspěšnost takového postupu ve srovnání s výsledky „ruční“ kalibrace.

V lokalitě Potůčky byly k dispozici údaje ze tří vrtů vzdálených asi 15 metrů. Údaje obsahovaly především četnosti a směry puklin, jejich povrch a výplně. Dále byly k dispozici výsledky karotážních testů v hlavních propustných etážích vrtu. Pro oblastní model okolí vrtů byl pro modelování asi 4 km² k dispozici návrh 5+5 profilových řezů zpracovaný geologem. Pro kalibraci modelu je pro takto málo definované oblasti, kde jsou výsledky značně závislé na dodatečných předpokladech, použití standardních algoritmů kalibrace velmi problematické až nemožné.

Podobná situace byla k dispozici i při výzkumu lokality melechovského masivu. Zde byly k dispozici výsledky z pěti vrtů do hloubky asi 125 metrů vzdálených několik set metrů a několik profilových řezů a karotážní zkouškou prokázané komunikace mezi vrty. Ostatní vstupní údaje pro modelování transportních procesů bylo nutné předpokládat.

Nejsložitější situace pro stavbu modelu byla v lokalitě Cajamarca. Zde bylo na základě povrchového výzkumu hornin a znalostí vývoje geologických struktur stanoveno pět profilových řezů. Okrajové podmínky byly stanoveny jednak z historických měření dešťových srážek a jednak z měření průtoků v horkých pramenech.

Dosažené výsledky

Výsledky kalibrace konkrétních úloh jsou shrnuty v části V této zprávy. Dalším výsledkem je zobecnění kalibrace publikované v disertační práci a metodické zprávě Lenky Čížkové do programového kódu. Na základě uvedené disertační práce byly dále provedeny testy aplikovatelnosti volně dostupného programu UCODE pro kalibraci dalších úloh, zejména modelů chemických reakcí, na které budou navazovat další dílčí práce úkolu 3M. Dále byly provedeny dílčí kalibrace na jednotlivých modelech. Například výsledky kalibrace hydraulických parametrů testovací kolony jsou stručně shrnuty ve zprávě Výzkumného centra „Testování nového transportně-reakčního modelu“ ze září letošního roku, jejímž autorem je Ing. Vladimír Wasserbauer, CSc.

Návrh dalších prací

Hlavním výsledkem úloh kalibrace je kromě aplikace kalibrovaných modelů nabytá zkušenost z kalibrace úloh různého typu a rozdílných vstupních parametrů a rozdílných možností monitorování časových řad stavových hodnot. Pro řešení reálných úloh bude nezbytné získání i zkušeností z výpočtu vektorů citlivosti závislostí změn vektorů stavových hodnot na změnách vektorů vstupních parametrů a ze získaných závislostí určit vhodný postup při kalibraci modelu. Úlohy tohoto typu budou vycházet z modelů řešených v uplynulém období v uvedených lokalitách a jsou plánovány na příští rok.

Z důvodu variabilnosti dílčích prací v rámci úkolu 1M a výrazné vazby dílčích úkolů na konkrétní aplikace byly dílčí úkoly řešeny s minimální vzájemnou provázaností. ***Proto pro další období navrhujeme převést dílčí práce tohoto úkolu do ostatních úkolů, které řeší konkrétní typy aplikací (zejména 2M a 3M) a samostatný úkol 1M zastavit.***

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	23 (50)

2 Výzkum a implementace modelů proudění podzemních vod

Na řešení se podíleli: Jiřina Královcová, Jiří Maryška, Otto Severýn, Miloslav Tauchman, David Tondr, Tomáš Dolanský, Zuzana Capeková, Klára Císařová

Zadání a cíl výzkumných prací

Hlavním cílem výzkumných prací v oddělení modelování hydrogeologických procesů je vytvoření souboru programových produktů, které budou zahrnovat všechny podstatné informace o horninovém prostředí měřené, monitorované sekci Horninové prostředí. Z tohoto důvodu jsou plánované úkoly oddělení směřovány k využití metodiky modelování k řešení reálných úloh. Výsledky těchto prací porovnané s následnými měřeními v místě aplikace pak tvoří zpětnou vazbu pro další úpravy a doplnění jednotlivých programových modulů respektive vývoj modulů nových. Vedle dále uvedených aplikací řeší oddělení stanovení koncepce a další rozvoj jednotlivých programových produktů. Význam těchto prací spatřujeme v doplnění modelů o podstatné fyzikální vlivy jako jsou nehomogenní teplotní pole v horninovém prostředí, změny proudění v souvislosti se změnami hustoty příměsí respektive látek rozpuštěných v podzemní vodě a detailní popis struktury horninového prostředí včetně tektonických poruch, geologických zlomů i jednotlivých puklin, jejich geometrie, povrchů případně výplní. Cílem tohoto postupu je vytvoření geologicky i fyzikálně přesného modelu prostředí, který bude schopen poskytovat výsledky pro navazující transportní modely a následné hodnocení i z hlediska ekologických rizik. Právě v této oblasti vidíme zásadní přínos vývoje vlastních modelů, které připravují nástroj pro získání výsledků a podkladů pro navazující výpočty transportních a chemických procesů výrazně nelineárních a velmi citlivých na vstupní data. Komerční programy hydrogeologických modelů obvykle homogenizují vstupní data na jednotlivých suboblastech. To je odůvodněno jednak snazším naplněním modelu vstupními údaji, jednodušší obsluhou a konečně mnohdy i malým počtem informací o horninovém prostředí. Aplikovat modely reakčního transportu komerčních programů proudění na takové výsledky je málo věrohodné.

Cílem výzkumných prací v uplynulém období bylo studium vlastností puklinového a kombinovaného modelu proudění (kompatibilní verze) na reálných úlohách. Puklinový model byl aplikován na výpočet etážových zkoušek v oblasti Potůčky v Krušných horách. Pro výpočty proudění oblastního charakteru v těže lokalitě a následně též i v lokalitě melechovského masivu a v lokalitě Cajamarca byl testován kombinovaný model. Dále bylo v uplynulé etapě zpracováno odvození modelu a jeho výpočetního algoritmu.

Postup prací – metodika

Vývoj programových modulů je založen na dvou matematických formulacích a to primární formulaci úlohy proudění a smíšené hybridní formulaci. Cílem prací bylo aplikovat formulace na složité horninové struktury obsahující průsakové bloky hornin, puklinové zóny respektive jednotlivé hydrogeologicky významné pukliny a konečně zahrnout i vliv liniových prvků vzniklých jak tektonickou činností tak i jako lidská díla (důlní šachty, tunely, průniky puklinových zón a podobně). Pro takové prostředí byl vyvinut program 123FLOW, jehož základní verze pro případ nasycené zóny a ustáleného proudění již byla použita ve výše uvedených lokalitách. Kalibrace modelů v přírodních tlakových podmínkách není možná v reálném čase (změny tlakových poměrů a následné odezvy trvají několik let a mnohdy i mnohem déle) Proto jsou modely kalibrovány na výsledcích karotážních testů, které krátkodobě (hodiny až dny) vyvolávají neustálené podmínky. Proto je nezbytné i model upravit

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	24 (50)

na tyto podmínky. Odvození základní i upravené verze algoritmu pro uvedené situace je součástí zprávy.

Dosažené výsledky

Výsledky tohoto oddělení lze rozdělit na výsledky vývoje a testování nových algoritmů pro výpočet tlakových polí a vektorových polí filtračních rychlostí a výsledky aplikací modelů na výpočet reálných úloh na kombinovaných sítích (oblast melechovského masivu a oblast Cajamarca – Peru).

Popis výsledků a shrnutí řešení reálných úloh je obsažen v části V této zprávy. V souhrnu jsou uvedeny též možné etapy dalšího postupu využití modelů v uvedených lokalitách. Studium chování modelu FLOW123D na testovacích úlohách 1D-2D, 2D-3D a 1D-2D-3D, přesněji jeho kompatibilní verze je úkol, který v současnosti kontinuálně probíhá. Souhrnné výsledky budou součástí následující zprávy respektive publikace připravené k vydání v průběhu příštího roku. Další řešenou úlohou je identifikace tenzoru hydraulické propustnosti v puklinových systémech horninového prostředí s různým stupněm zahuštění. V současnosti jsou připraveny sady puklinových sítí, na kterých bude identifikace probíhat. Výsledky této úlohy lze očekávat v průběhu roku 2007.

Návrh dalších prací

Úloha proudění podzemní vody v různých typech horninového prostředí tvoří základ modelování navazujících úloh transportu látek, ovlivnění životního prostředí a konečně i dopadu na zdraví populace. V následující etapě budou opakovány výpočty v uvedených lokalitách, pro něž máme vstupní informace, a pro tyto výpočty budou využity nově vyvíjené a doplněné modely.

Především budeme na zkušenostech z geologického výzkumu v lokalitách Potůčky a Melechov stavět model pro studium chování látek (radionuklidů) ve vzdálených polích hypotetického úložiště radioaktivních odpadů. Cílem těchto studií je získat podklady pro možná rizika vývoje takových úložišť v dlouhodobých časových horizontech.

Dále budeme zpřesňovat model pro hydrogeologické výpočty v okrajových polích kontaminace Strážského bloku po chemické těžbě uranu. Tyto detailní studie mají sloužit pro posouzení stability imobilizačního procesu konzervace zbytkových roztoků v podzemí a pro přípravu experimentů v místě kontaminace.

Konečně bude připravována síť pro modelování změn hydrogeologických situací v průběhu a po revitalizaci podkrušnohorské krajiny po těžbě hnědého uhlí. Tento úkol bude řešen ve spolupráci s dalšími partnery jako jsou VUHU, UJEP, UT AV ČR, Aquatest a ČGS.

Další aktivity budou zaměřeny na modelování průsaku tekutin přes vrstevnaté struktury filtrů složené z nosných vrstev a nanovláknenných výplní.

Vývoj modelových nástrojů bude zaměřen na nekompatibilní verze modelů proudění a to jak pro smíšenou hybridní formulaci úlohy, tak i pro klasickou primární formulaci. Pro obě varianty budou modely doplněny o moduly neustáleného režimu proudění a moduly zahrnující vliv nehomogenního tepelného pole, vliv nehomogenní hustoty rozpuštěných látek, ale i vlivy velikosti unášených částic respektive koloidních roztoků. Všechna uvedená doplnění budou vyžadovat propojení modelů proudění s modely transportu.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	25 (50)

Následné etapy řešení budou vyžadovat těsnější propojení činností všech oddělení sekce Modelování, ale i zahájení užší spolupráce se sekci Informatika při stavbě a využití databází údajů pro přípravu sítí a jejich plnění a kalibraci modelů.

Především plánujeme tvorbu rozsáhlejších sítí (o několika set tisíc elementů) na základě vývoje programů pro automatické úpravy a zadávání vstupních dat a dále i využití potenciálu vyvíjených řešičů rozsáhlých řídkých soustav lineárních rovnic, které v uplynulém roce nebyly příliš využívány z důvodu větší náročnosti při nastavení vstupních parametrů řešiče. Pro úlohy do 20 tisíc elementů komerční řešič prostředí MATLAB poskytují vyřešení úloh do několika minut. Pro rozsáhlé soustavy časově závislých úloh o několika milionech proměnných bude užití speciálních řešičů nezbytné.

3 Výzkum a implementace modelů transportu látek v horninovém prostředí

Na řešení se podíleli: Jan Šembera a kolektiv, Milan Hokr a kolektiv

Úkol tohoto oddělení se sestává ze dvou dílčích částí. Modelování transportních jevů a modelování chemických reakcí.

Problematika formulace, implementace, testování a aplikace software pro modelování advektivně-difúzního transportu je na TUL tradiční a práce na této části úkolu Výzkumného centra spočívají zejména v úpravách a vylepšeních již existujících programů pro simulaci transportu rozpuštěných látek vodou proudící v porézním prostředí nebo puklinách skalního masivu.

Řešení tematiky modelování chemických reakcí bylo na TUL zahájeno se vznikem Výzkumného centra, bez návaznosti na rozsáhlejší předešlý výzkum. První úkoly, které byly v rámci tvorby modelů chemických dějů řešeny, souvisely s výběrem základních modelových problémů a se základním seznamováním týmu s jednotlivými aspekty problematiky. V roce 2005 byly vtipovány tři typy geochemických dějů, na jejichž řešení se výzkumný tým zpočátku omezí:

- oxidačně-redukční děje při sanaci znečištění chlorovanými uhlovodíky vtláčením manganistanu draselného,
- neutralizaci probíhající při mísení kyselých cenomanských vod znečištěných kyselinou sírovou a dalšími složkami v důsledku loužení uranu v lokalitě Stráž pod Ralskem s neutrálními až zásaditými roztoky z nadzemních technologií ve Stráži pod Ralskem,
- geochemické děje probíhající při dlouhodobém transportu dešťové vody masivem s obsahem vápníku.

Každý z uvedených dějů má vazbu na některý z komplexních úkolů Centra a vzájemně se významně liší tak, že přístupy k jejich modelování pravděpodobně nebudou moci být totožné. První problém se stal modelovým problémem pro podúkol Implementace a ověření výpočtu rovnovážných a kinetických reakcí metodou minimalizace Gibbsova potenciálu s diferenciálními vazbami, druhý problém je náplní řešení podúkolu Návrh a ověřování algoritmů pro modelování neutralizace in-situ ve Stráži pod Ralskem a třetí problém je přípravou pro řešení problematiky modelování šíření radionuklidů zvodnělým horninovým

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	26 (50)

prostředím v okolí hlubinného úložiště radioaktivního odpadu. Řešení třetího modelového problému zatím není vyjádřeno konkrétním podúkolem úkolu 3M.

Výzkum metod modelování transportních procesů

Cíle výzkumných prací

Celkovým cílem tohoto úkolu je vývoj transportních modelů, tj. vytváření numerických softwarových nástrojů pro simulace transportních procesů v porézním a puklinovém prostředí a získávání a zpracování podkladových dat (materiálových parametrů, koeficientů). Tento cíl je naplňován jednak dlouhodobými úkoly postupného vývoje kódů a jednak dílčími rozšířeními existujících kódů pro speciální případy a výpočty konkrétních úloh demonstrujících vlastnosti koncepčních modelů a numerických schémat.

V roce 2006 bylo v tomto smyslu konkrétně zadáno: vývoj nového kódu založeného na objektově orientovaném přístupu (dlouhodobý), rozšíření funkcí existujících modelů/kódů (nanočástice místo roztoku – dlouhodobý, imobilní zóna v puklinovém prostředí – jednorázově), vývoj a testování nových numerických postupů (ukončené výsledky – výpočet lokálních matic, a-posteriorní odhady), úpravy rozhraní kódů (jednorázové úkoly).

Metodika

Základním metodickým postupem většiny činností je odvození numerických schémat pro řešení rovnic různých typů transportních procesů a jejich implementace do podoby počítačového kódu. S hotovými programy jsou pak řešeny konkrétní testovací nebo reálné úlohy transportu. Nezbytnou součástí je dále návrh a implementace rozhraní modelů, tj. formátu datových souborů se vstupními a výstupními daty.

Dosažené výsledky

V rámci jednotlivých typů podúkolů byly dosaženy tyto hlavní výsledky:

- Ve vývoji objektového konečněprvkového kódu byly do téměř finálního stavu vypracovány hlavní datové typy sítě, rozpracovány datové typy pro okrajové podmínky a kód otestován na modelové síti s kombinací trojúhelníků a čtyřúhelníků, včetně anizotropie.
- V modelování transportu nanočástic byla zpracována rešerše metod, implementována do existujícího programu „Gen-tran“ otestován základní vztah pro tzv. „size exclusive effect“ způsobující odlišnou rychlost pohybu částice než vody.
- Úpravy kódu FTRANS pro výpočet transportu látky v diskrétní puklinové síti, do programu doplněn algoritmus a-posteriorního odhadu chyby (v teoretickém článku publikovaný výsledek), byla podstatně snížena časová náročnost výpočtu při načítání sítě a bylo rozšířeno uživatelské rozhraní o zadávání parametrů reálných sorpčních izoterm a rozpadové reakce. Pro tento kód byl dále zdokonalen generátor puklinové sítě ze statistických dat (zamezení vzniku nežádoucích vzájemných poloh a velikostí puklin a trojúhelníků). Pro oba kódy byl dopsán uživatelský manuál.
- Byla naprogramována základní verze modelu transportu látky v puklinovém prostředí v konceptu multidimenzionálního (kombinovaného) modelu (kód Flow123D) se zahrnutím rozlišení každé dimenze na mobilní a imobilní zónu a pro tento model

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	27 (50)

(kód) byl proveden testovací výpočet, který potvrdil vzájemný vztah mezi modelem dvojího kontinua a modelem multidimenzionálním pro systém puklina–skála.

- Byla dokončena implementace zpřesněného algoritmu pro výpočet lokálních matic smíšených-hybridních prvků pro síť trojbokých hranolů s nevodorovnými podstavami, na základě makroprvků.

Využitelnost výsledků

Objektově orientovaný kód by měl v budoucnu umožnit efektivnější implementaci konečněprvkových schémat pro sdružené procesy (více vzájemně propojených rovnic, např. THMC procesy v hlubinném úložišti) a adaptivního zjemňování sítě. Kód FTRANS a k němu příslušný generátor puklin je možno bezprostředně použít k simulaci transportu látky v puklinovém prostředí, např. modelové úlohy úniku radionuklidů, testy na vrtech v granitu (Potůčky, Melechov). Formulace transportu v multidimenzionálním konceptu s imobilní zónou poskytuje fyzikálně realističtější reprezentaci pohybu látky v puklině a skále a kód je určen pro tytéž uvedené simulace. Model transportu nanočástic je vytvářen přímo jako nástroj pro analýzu sanační metody pomocí částic nulmocného železa.

Výzkum metod modelování chemických procesů

Cíle výzkumných prací

Úkol modelování chemických reakcí zahrnuje jednak rešerše (v letošním roce to byla rešerše dostupných programů pro simulaci chemických dějů a výběr programů, které budeme používat pro srovnávání výsledků), experimentální práce, výběr a srovnávání numerických metod, návrh postupů zjednodušování složitých chemických dějů, zpracování dat, implementace a ověřování počítačových programů. Součástí úkolu Chemické modely 2006 byla také formulace společného projektu Výzkumného centra a vlastníka Haldy Buštěhrad pro výzkum metodiky určení umístění a vydatnosti zdrojů nebezpečných látek a tepla v prostředí starých skládek průmyslového odpadu.

V loňském roce, kdy byly práce na úkolu zahájeny, proběhla základní příprava – sestavení týmu a určení směrů zkoumání – a bylo zahájeno řešení některých dílčích problémů, pro které byly členové týmu nejlépe připraveni. Vznikl tak počítačový program realizující „standardní přístup“ k modelování kinetických a rovnovážných reakcí, radioaktivních rozpadů a sorpce, který byl propojen s modelem advekčního transportu v porézním prostředí. Dále byl rozpracován návrh přístupu k modelování kinetických a rovnovážných reakcí jako optimalizační úlohy a jeho ověření na konkrétní úloze oxidace manganistanem, byl navržen postup zjednodušeného výpočtu pH směsi konkrétních roztoků a navrženy laboratorní testy. Byl sestaven harmonogram prací pro další období. V letošním roce byly rozpracovány další dílčí problémy, které byly identifikovány v loni navrženém harmonogramu a zahájen další dílčí úkol, jehož řešení je nutné pro úspěšné modelování problematiky neutralizace ve Stráži pod Ralskem – výzkum složení a podmínek konstituce a rozpouštění koloidů. Řešení tohoto úkolu bylo zahájeno v sekci Horninové prostředí. Výsledkem prací v roce 2006 je také upravený harmonogram pro rok 2007.

Metodika

Výběr a tvorba softwarových prostředků pro modelování chemických reakcí je prováděna formou rešerše dostupných programů pro simulaci chemických dějů a výběr programů, které

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	28 (50)

budeme používat pro srovnávání výsledků, a formou programování vlastních softwarových prostředků realizující vybrané numerické postupy pro řešení rovnic popisujících chemické děje. Výsledkem výběru dostupných programů bylo rozhodnutí zakoupit Geochemist's Workbench a používat ho spolu s volně dostupným Phreeqc pro ověřovací výpočty. Programování vlastního softwaru bylo v roce 2006 soustředěno na tvorbu software pro výpočet chemických reakcí minimalizací Gibbsova potenciálu. K minimalizaci Gibbsovy energie jsou použity dvě metody. Nejprve jsou všechny omezující podmínky linearizovány a potom je použita robustní a efektivní metoda s proměnnou metrikou BFSG (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno), která využívá gradient, ale nepočítá druhé parciální derivace. Metoda BFSG je založena na postupné aproximaci inverzní Hessovy matice.

Jedním z teoretických úkolů je tvorba nástroje pro spolehlivý odhad standardních termodynamických vlastností zejména organických kontaminantů ve vodných roztocích v širokém rozmezí teplot a tlaků. Tyto údaje (především chemické potenciály rozpuštěných látek) jsou nezbytné k modelování jejich distribuce v životním prostředí a chemických reakcí ve vodě a v horninových roztocích. Práce metodicky vychází z dříve publikované stavové rovnice pro standardní termodynamické vlastnosti v širokém rozmezí podmínek a její aplikace ve strukturně-příspěvkovém schématu pro termodynamické vlastnosti vodných roztoků uhlovodíků.

V laboratořích Výzkumného centra probíhalo zejména zavádění metodiky transportně-reakčních experimentů na pískovcových kolonách, pro které bylo do pryskyřice zalito šest pískovcových monolitů a provedena část plánovaných experimentů. V souladu se záměrem Centra bylo vypsáno výběrové řízení na nákup rozpouštěcího kalorimetru, na jehož základě byl zakoupen isoperibolický rozpouštěcí kalorimetr Calorimetry Sciences CSC 4300.

Dosažené výsledky

Byla provedena rešerše existujících chemických modelů a ve spolupráci s odborníky na modelování chemických reakcí byly vybrány dva počítačové modely pro srovnávání (Phreeqc a Geochemist's Workbench). Výsledek rešerše a volba a nákup softwaru vedl přirozeně k zahájení prací na zaškolení pracovníků Centra a studentů v práci s tímto softwarem.

Na základě literatury byl sestaven a otestován software pro výpočet chemických reakcí minimalizací Gibbsova potenciálu a software pro simulaci 1D transportních a chemických dějů v experimentální koloně.

Pro transformaci dat z dostupných databází do podoby vhodné pro výpočty a porovnávání bylo sestaveno několik programů pro sestavování tabulek výsledků programu Phreeqc a je zpracováván program pro podobné zpracování výstupů simulací pomocí Geochemist's Workbench. Také byla aplikována metodika Sedlbauer-O'Connell-Wood na vodné roztoky aromatických uhlovodíků substituovaných fenolickou, popř. amino-skupinou a byla získána data o kalorimetrických vlastnostech vodných roztoků kyslíkatých organických látek. Byl proveden sběr dat a zpracování modelu pro vodné roztoky etherů a ketonů.

Byla provedena část kolonových experimentů v laboratoři Výzkumného centra pro stanovení geofyzikálních parametrů a zhotovena aparatura na měření koeficientu filtrace. Výsledky stanovení porozity objemovou/hustotní metodou jsou srovnatelné se saturační metodou.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	29 (50)

Byla provedena rešerše dostupných informací o skládkách pevného odpadu ve Středočeském kraji a zvláště o Haldě Buštěhrad, byl zpracován a do soutěže v programu Trvalá prosperita podán společný projekt TUL a REAL Leasing, s. r. o., majitele Haldy Buštěhrad. Projekt nebyl doporučen k financování, proto probíhá další jednání s vlastníkem skládky s cílem rozhodnout o způsobu odstranění nedostatků vytýkaných oponenty (zejména výše a struktura rozpočtu) a uplatnění projektu v jiném dotačním programu, nebo o zahájení výběru jiné lokality.

Využitelnost výsledků

Výběr a tvorba simulačního softwaru, transformace a doplňování termodynamických databází a laboratorní experimenty jsou dílčími pracemi nutnými k tvorbě, kalibraci a ověřování numerických modelů konkrétních dějů. Využití výsledků tohoto výzkumu směřuje přímo k aplikacím – simulaci konkrétních sanačních zásahů in-situ (imobilizace anorganické kontaminace ve Stráži pod Ralskem, sanace organického znečištění oxidací manganistanem draselným či redukcí nulmocným železem apod.), sanace skládek průmyslového odpadu ad.

Návrh dalších prací

Tématiky tvorby modelů transportu a chemických reakcí mají mnoho společného a zejména z hlediska modelování konkrétních aplikací je třeba navrhovat modelování reakčního transportu jako celek. To bylo motivem pro zahájení řešení těchto problémů v rámci Výzkumného centra pod jedním úkolem 3M. Vzhledem k tomu, že řešení tvorby modelů chemických reakcí bylo na pracovišti TUL zahajováno se vznikem Centra a vývoj modelů transportních jevů je naopak ve velmi pokročilém stádiu a z určitého hlediska jej lze považovat za úkol rozšiřování aplikačních možností již existujících modelů transportu, jsou dílčí úkoly obou částí tohoto úkolu vzájemně velmi rozdílné. ***Pro další období navrhuje v sekci Modelování vzájemně oddělit tyto dva úkoly a ustavit úkol Výzkum metod modelování transportních procesů a úkol Výzkum metod modelování chemických procesů.***

4 Výzkum metod pro řešení rozsáhlých řídkých systémů lineárních rovnic

Na řešení se podíleli: Miroslav Rozložník, Miroslav Tůma, Pavel Jiránek

Souhrnná část zprávy obsahuje informaci o základních úkolech, výsledcích a plánech v oblasti řešičů rozsáhlých a řídkých soustav lineárních algebraických rovnic. Zde v abstraktu se soustředíme především na oblast výsledků. Dosažené cíle můžeme rozdělit na zhruba tři oblasti, které budeme podrobněji popisovat níže. Za prvé, vyvinuli jsme a implementovali program NI2, který řeší symetrické rozšířené soustavy metodou duálních proměnných. Tento kód implementuje řadu originálních prvků popsanych v článku našeho autorského kolektivu, který byl nedávno publikován v ETNĚ. Za druhé, některé rozšířené systémy jsme analyzovali teoreticky. Tato analýza může později vést k vývoji nových efektivních zastavovacích kritérií pro předpodmíněné iterační metody. Za třetí, začali jsme analyzovat některé aplikačně motivované metody a postupy, které se jeví vhodné pro řešení soustav vznikajících v aplikacích našeho projektu. V této oblasti bychom se postupně v průběhu projektu chtěli dostat blíže k efektivním moderním paralelním implementacím technik jako je například technika rozkladu na oblasti.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	30 (50)

Návrh dalších prací

Naším návrhem pokračujících prací jsou následující úkoly, které si rozdělím stejně jako jsme výše uvedli na úkoly více implementační, úkoly teoretičtější a úkoly s nemalou perspektivou na změny v našich řešících paradigmatech. Úloha praktičtěji zaměřená bude pokračovat dalšími implementačními pracemi. Předpokládáme, že bude vytvořen nový program, který má pracovní označení N11, je založen na souběžně tvořených procedurách knihoven operací s řídkými maticemi a bude řešit úlohu smíšenou metodou primárních a duálních proměnných. To mimo jiné znamená, že transformace, která je obvyklá v metodě duálních proměnných a která v úloze proudění tedy počítá nejprve rychlosti proudění a poté z nich tedy dopočítává tlaky bude nahrazena pouze neúplnou transformací. V obecném případě bude tento postup originální. O jeho plánování jsme již odbornou veřejnost informovali.

Za druhé, význam teoretické analýzy řešení rozšířených systémů tím nebude nikterak snížen. Na tomto úkolu chceme dále intenzivně pracovat.

Jak již bylo zmíněno výše, odhady pro maximálně dosažitelnou přesnost vypočtených aproximací závisí také na maximální normě aproximace v průběhu celého výpočtu, která může být významná. Tato závislost bude studována v další publikaci, která bude k dispozici v průběhu podzimu tohoto roku. Další článek se bude zabývat analýzou stability metod, které využívají tříčlennou rekurenci pro výpočet směrových vektorů, kde se ukazuje, že tyto implementace jsou méně stabilní než jejich matematicky ekvivalentní verze, které používají zdvojené dvojčlenné rekurence. Tato publikace vznikne v spolupráci s prof. Martinem Gutknechtem ETH v Zurichu. Analýza numerické stability iteračních metod používaných zejména pro řešení soustav sedlových bodů je tématem dizertační práce ing. Pavla Jiráňka. Předpokládáme, že dizertační práce bude předložena v průběhu příštího roku.

Hlavním cílem budoucích úkolů je postupné zavádění výsledků implementace do řešení aplikací, které určitě překročí rámec úloh plánovaných na příští rok. Předpokládáme, že současně významně ovlivní konstrukci vyvíjených řešičů. Dalším úkolem, o kterém předpokládáme jeho intenzivní zkoumání, bude postup založený na rozdělení diskretizované oblasti na části a navržení metody založené na Schwarzových iteracích. Tento úkol souvisí s naší snahou vyvíjet paralelní implementace.

5 Vývoj preprocesorů a postprocesorů pro přípravu dat a grafické výstupy

Na řešení se podíleli: Klára Císařová, Martin Vohralík, Zuzana Capeková, Jiří Hnídek, Miloš Turek, Martin Vlasák, Roman Špánek

Cíle vývoje preprocesorů a postprocesorů

V rámci tohoto úkolu se vyvíjí počítačové nástroje, které umožní zefektivnění prací spojených s přípravou a interpretací vstupních dat a výsledků modelování, obecně označované jako preprocesor a postprocesor. Úlohy řešené v rámci centra jsou obvykle spojené s konkrétní lokalitou, kde je nutné řešit akutní nebo předpokládané ohrožení území nějakou kontaminací nebo naopak vyhledávat území vhodné pro uložení nebezpečného odpadu a pod. Různá zadání reálných úloh mají řadu společných problémů a mnoho specifik na straně přípravy vstupních dat pro následné modelování a také naléhavou potřebu názorného sdělení výsledků odborné veřejnosti, která má následně přijmout konkrétní řešení. Hlavním cílem tohoto úkolu

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	31 (50)

je implementace souboru počítačových programů, které budou plnit základní vývoj geometrie výpočetní sítě a její plnění z databází fyzikálních a chemických parametrů horninového prostředí.

Metodika

Matematická formulace řešených úloh používá metodu konečných prvků. Předpokladem tvorby modelu je sestrojení třírozměrného geometrického a následně fyzikálněchemického modelu geologického území. Sestrojení geometrického modelu je technicky velice pracné. Pro účely centra se na vytvoření geometrického modelu používá volně užívaná aplikace GMSH a generátor puklin GenSiti Martina Vohralíka. Nabyté zkušenosti a z nich odvozená technologie návrhu a zpracování sítí je předmětem této části zprávy. Příprava potřebných datových struktur pro matematické modelování je iterační proces, kterým hledáme vhodný kompromis a korektní datové struktury, které umožní odpovídající výsledek následného modelování.

Data představují často rozsáhlé množiny elementů, ve kterých se ne zcela zřídka vyskytují chyby v identifikaci parametrů včetně určení okrajových podmínek apod. Všechny tyto práce jsou náročné a programová podpora je velmi speciální a je třeba ji účelově připravit a implementovat. Takto vzniká soubor programů, které by měly do budoucna tvořit sofistikovanější nástroje pro návrh sítí, jejich vizualizaci pro snadnější vyhledávání chyb a také další nástroje pro přípravu dat pro matematické modely. Jedná se o podpůrné prostředky pro zadávání fyzikálních vlastností pro matematické modely, ale i některé speciální geometrické úlohy související například s vyhledáváním sousednosti elementů, regularity, nebo spojené se zadáváním předpokládaných fyzikálních i chemických vlastností závislých například na hloubce těžiště elementu apod. Data popisující povrch terénu jsou obvykle v současné době získávána z GIS systémů a popisují terén různými souřadnými systémy. Proto byla věnována pozornost i problému používání souřadného systému WGS-84 ve světě a S-JTSK, který je používán v České republice v civilním sektoru a také vzájemným transformacím pro potřeby modelování. Kromě těchto úloh se skupina zabývá vizualizací dat na všech úrovních přípravy dat pro modelování a zobrazení výsledků modelování pro další matematicko-fyzikální analýzu řešeného problému, kde grafická informace může významně zlepšit kvalitu sdělované informace. Dalším problémem je prezentace výsledků na webu tak, aby bylo možné zobrazit maximum informace například animací či 3D interaktivní prezentací výsledků i mezivýsledků. Za tímto účelem byly testované možnosti formátu VRML, Javy a grafického studia Blender. Každou z těchto platform je možné použít pro definovaný účel.

Výsledky

Na konkrétních aplikacích bylo ověřeno zobrazení sítí a výsledků proudění podzemní vody VRML, Javu a Blender. Podstatným závěrem je skutečnost, že formát VRML bude zřejmě počítačovou minulostí a to jej pro budoucnost z dalšího testování a zkoumání vylučuje. Přesto pro úplné a kvalifikované odmítnutí tohoto způsobu prezentace bylo provedeno testování zobrazení na konkrétní síti vygenerované pomocí GMSH. Po prostudování potřebných datových formátů, byla data ze sítě „Melechov“ transformována do formátu VRML a odzkoušená prezentace na webu. Důvody odmítnutí tohoto přístupu jsou jednak v nejisté budoucnosti formátu VRML a také v nevhodnosti výrazových prostředků VRML, které vedou k neúměrnému zbytnění dat. Zejména zbytnění datových souborů, při vědomí toho, že se jedná o prezentaci na webu a tedy přenosy dat po síti, považujeme za zásadní nevýhodu použití VRML. Vizualizace pomocí programu Blender poskytuje kvalitativně větší možnosti

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	32 (50)

a lepší výsledky než vizualizace v programu GMSH. Nicméně v návrhu geometrie sítě poskytuje GMSH a GenSiti nezastupitelné funkce a proto bude i v budoucnu používán a zdokonalován podpůrný ToolBox programů pro řešení problému návrhu geometrie sítě. Blender je díky Python API mnohem flexibilnější nástroj na vizualizaci především výsledků simulace, které lze zobrazit mnohem názornějším způsobem. Naopak vlastní načítání dat do scény je v Blenderu mnohem pomalejší než v programu GMSH, protože vlastní importní plugin je naprogramován v interpretovaném programovacím jazyku. Jeho flexibilita, ale převáží jeho nižší výkon proti programu kompilovanému do binárního kódu. Byla vytvořena sada Python skriptů, které dokáží načítat datové soubory s příponami MSH, MTR, BCD a POS do programu Blender a ověřená možnost importovaná data interaktivně prohlížet ve 3D nebo z nich vytvořit animovanou sekvenci.

Postup dalších prací

Animace podzemního proudění ve 3D na základě spojení se všemi datovými strukturami, které pro modelování v tuto chvíli na úrovni pre- a postprocesoru používáme, bude předmětem dalšího vývoje. Presentace na webu pro co nejširší okruh uživatelů vede na použití jazyka Java a jeho grafického API Java3D, kterou je pak možné ve formě appletu bez problémů implementovat přímo do webové stránky. Nároky na SW vybavení uživatele jsou minimální. Vyžadována je Java Virtual Machine a rozšíření Java3D. Nicméně vzhledem k tomu, že jak JVM tak i Java3D jsou volně dostupné na internetu a JVM se navíc pomalu stává standardním vybavením počítačů, je toto akceptovatelné. Rychlost bylo ověřena pomocí pilotního appletu s víc než uspokojivými výsledky.

6 Výzkum metod a nástrojů pro hodnocení následků působení chronických zátěží

Na řešení se podíleli: Hana Čermáková a kolektiv

Výzkum a vývoj nástrojů pro hodnocení následků působení chronických zátěží je zaměřen na kvantifikaci ekologických škod a hodnocení efektivity procesů jejich zmírňování v ekonomických ukazatelích.

Metodika kvantitativního hodnocení ekologických rizik

V průběhu loňského roku jsme se seznámili s několika postupy a metodikami kvalitativního hodnocení rizika. Kromě jiného to byly metodiky H&V index a IsaTech (doporučované MŽP) a metodika EEA doporučená (šířená) ve státech Evropské unie. Tyto metodiky však nejsou zcela vhodné k posouzení rizika chronických zátěží, protože v dostatečné míře nezohledňují zranitelnost regionálně významných akumulací podzemních vod, jejichž případné znečištění škodlivými látkami patří k nejvýznamnějším dopadům jejich působení. Souhrnné vyjádření rizika podle těchto metodik dle našeho názoru neposkytuje dostatečně jasné argumenty k posouzení závažnosti potenciálního poškození šetřené lokality a tedy i k jasné podpoře rozhodnutí o realizaci sanace. Žádná z dosud užívaných metodik rovněž nehodnotí ekologické škody v kvantitativních ukazatelích, aniž by se zabývala finanční stránkou celé problematiky.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	33 (50)

Cíle

Z tohoto důvodu se jedním z našich cílů stal v první řadě návrh nové metodiky, která by slučovala přednosti námi prostudovaných postupů a která by vyhovovala potřebám posouzení zranitelnosti lokalit s chronickou zátěží v podmínkách ČR. Dlouhodobě sledovaným cílem je pak vyjádření škod na jednotlivých receptorech životního prostředí v peněžních jednotkách.

Posouzení nebezpečnosti kontaminantů z hlediska jejich toxicity a mobility je prvním krokem k hodnocení rizik. Proto prvním z dílčích cílů je vytvoření **datábase a klasifikace toxických látek**. Práce soustřeďuje základní pojmy a charakteristiky toxicity (nebezpečnosti) látek. Uvádí přehled dostupných zdrojů potřebných informací o toxikologických, fyzikálních a chemických vlastnostech látky, o limitech jejich koncentrací v jednotlivých receptorech životního prostředí a o hodnocení expozičních dávek pro různé skupiny populace.

Druhým dílčím úkolem bylo zpracování **metodiky předběžného hodnocení ekologických rizik**. Cílem úkolu bylo vytvoření metodiky, která by byla vhodným nástrojem při posuzování nebezpečnosti působení chronických zátěží na jednotlivé receptory životního prostředí a která by poskytovala rychlou informaci o nebezpečnosti šetřené zátěže v prvotní fázi hodnocení rizika při nedostatku detailnějších informací.

Konečným příjemcem ekologických rizik je člověk. Proto posledním článkem řetězce úlohy ekonomické kvantifikace ekologických škod je úloha **finančního vyjádření ztráty života, resp. poškození lidského zdraví**. Přes jistý etický podtext, který u této úlohy bezesporu pocítujeme, má i tato problematika na manažerské úrovni svoji ekonomickou stránku. Ať už se jedná o oblast bezpečnosti práce (hledání odpovědi na otázku, zda podnikatelský subjekt má financovat bezpečnost práce svých zaměstnanců nebo náhrady pracovních úrazů), zdravotnictví (porovnání efektu vynakládání financí na prevenci proti nákladům léčení), formulaci požadavků na stav životního prostředí (náklady odstraňování škod na životním prostředí proti nákladům na jejich zamezení) a další, principiálně proti sobě stojí dvě základní ekonomické kategorie: náklady a užitek, který vynaložení těchto nákladů přináší. Zpracování databáze nákladů na prevenci i na možné následky při poškození zdraví je hlavním cílem tohoto dílčího úkolu.

Metodika

Metodika předběžného hodnocení rizika je zaměřena na posouzení ekologických rizik chronických zátěží. Riziko je hodnoceno odděleně pro receptory ovzduší, půdy a bioty, povrchové vody a podzemní vody (s rozlišením zvodní). Metodika je zpracována do podoby dotazníkových formulářů s předepsanou strukturou možných odpovědí. Každé odpovědi je přiřazen předepsaný počet bodů. Odpovědi hodnotí konkrétní charakteristiky šetřené zátěže a vypovídají o typu a rozsahu znečištění, vlastnostech znečišťující látky, dispozicích látky i přírodního prostředí k migraci kontaminace do dalších receptorů, charakteristikách receptoru v šetřené lokalitě ad. K souhrnnému vyjádření nebezpečnosti jsou využity semikvantitativní metody hodnocení. Odděleně lze u jednotlivých odpovědí zadávat míru nejistoty, která dokresluje platnost souhrnných výsledků.

V současné době neexistuje přímá cesta k finančnímu vyjádření reakce organismu na škodlivou látku. Důvodů je mnoho. Především odpověď organismu na působení konkrétní škodliviny není jednoznačná. Je třeba rozlišit cesty expozice látkou (přes ovzduší, kontaminované potraviny nebo vodu), cesty vstupu látky do organismu (inhalací, ingestí, dermálním kontaktem) i typ příjemce (muži, ženy, pracující v riziku, rizikové skupiny – děti, těhotné, kojící matky, senioři). U většiny látek nejsou k dispozici záznamy o jejich přímém

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize			Strana (celkem)
	0	1	2 3	34 (50)

působení na člověka a lze je pouze do jisté míry předpokládat a usuzovat na základě pokusů s nižšími organismy. V tomto případě je ale problematická jakákoliv kvantifikace těchto důsledků. Působení škodliviny na člověka je ve většině případů provázeno synergickým efektem anamnézy každého konkrétního pacienta a není tedy možné vyšetřit čistý efekt působení škodlivé látky. Lze jen konstatovat, že neexistuje nic, co by se dalo nazvat „cenou diagnózy“. Proto jsme v dané problematice odkázáni na hledání cest nepřímých a zejména cest jakýmkoliv způsobem schůdných.

Výsledky

K hodnocení potenciálního nebezpečí plynoucího z chronické zátěže slouží sešit Microsoft Excel, v němž je možno provést jednoduché vyhodnocení nebezpečnosti šíření kontaminace v konkrétní lokalitě. Vyvinutý nástroj byl otestován aplikací na lokalitu Kuřívody. Metodika byla též dopracována do softwarového produktu MHER.

V současné době jsou k dispozici práce, které se zabývají ekonomickým vyjádřením ceny života, případně obsahují teoretické úvahy o přístupech k ekonomické kvantifikaci poškození zdraví. Každá z těchto teorií se však potýká se složitostí řešeného problému, zahrnuje řadu předpokladů, publikované výsledky obsahují množství nejistot a uvedené hodnoty i v rámci jednoho textu se významně liší. Proto bylo nutno v prvé řadě se zorientovat v tomto materiálu, seznámit se s jednotlivými přístupy a podpůrnými údaji, kontaktovat subjekty zabývající se problematikou zdravotnictví a šetření zdravotních rizik, analyzovat jednotlivé informace a teprve na jejich základě formulovat prakticky průchodné cesty řešení ekonomické kvantifikace zdravotních rizik. Řešením úkolu je souhrnný přehled jednotlivých teorií problematiky ekonomiky lidského života a zdraví se stručnou charakteristikou publikovaných přístupů. Závěr práce přináší návrhy postupů, kterými by bylo možno ekonomickou kvantifikaci škod na lidském zdraví řešit.

Návrh dalších prací

Zpracování postupů a algoritmů pro odvození individuálního a společenského rizika působení chronické zátěže a algoritmů hodnocení nákladů na zdravotní péči související s následky ekologických zátěží v postižené oblasti. Ověření správnosti navrženého algoritmu na zvolených modelových, případně i reálných úlohách pomocí sešitu Excel-MS. Implementace algoritmu ve vhodném programovacím jazyku. Tvorba a trvalé doplňování databáze ekonomického hodnocení zdravotních následků obyvatel vystavených riziku působení chronické zátěže.

Koncepce obecného ekonomického modelu sanace

Po počáteční potřebě urychleného vyrovnání s evropským standardem environmentální problematiky se v ČR do popředí dostávají ekonomické aspekty managementu ekologických rizik. Posuzují se výdaje na životní prostředí a jejich efektivnost, je řešena problematika internalizace externalit, hledají se vhodné legislativní nástroje zpoplatnění jednotlivých cest využívání přírodních zdrojů a přírodního prostředí, posuzují se možnosti využití nástrojů trhu i legislativy ad. Tato část problematiky managementu ekologických rizik je řešena cestou vytvoření koncepce obecného ekonomického modelu sanace.

Cíle

Ekonomické aspekty managementu rizik zahrnují dva základní cíle a směry úkolů:

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	35 (50)

- ekonomické hodnocení skutečných nebo potenciálních ekologických škod (posouzení ekonomické stránky dopadů působení škodlivin na složky ŽP v celém komplexu),
- ekonomické hodnocení efektivnosti nápravných nebo preventivních opatření (nápravnými opatřeními jsou sanace škodlivinami zasažených lokalit, preventivními opatřeními jsou investice do kvalitnějších technologií s menšími zásahy do přírodního prostředí, budování čističek, odlučovačů a dalších technologických zařízení snižujících negativní dopady na životní prostředí).

V oblasti sanační problematiky směřuje management rizik k řešení těchto základních úloh, které jsou i cíli tohoto dílčího úkolu:

- posouzení ekonomické náročnosti technologických variant sanace,
- výběr optimální technologické varianty sanace,
- hodnocení ekonomických dopadů environmentálních škod,
- stanovení efektivní míry sanace (posouzení cílových parametrů sanace).

Metodika a výsledky řešení

V první etapě přípravy koncepce obecného ekonomického modelu sanace byly formulovány základní ekonomické postoje k posouzení efektivnosti sanačního procesu v obecné rovině, vycházející ze vztahu nákladů prevence ekologických škod a ekonomického vyhodnocení jejich dopadu. Byla navržena koncepce obecného ekonomického modelu sanace a programový systém sestavení ekonomického modelu sanace, který vede k rychlému, operativnímu a pohotovému vyhodnocení efektivnosti technologicky přípustných variant sanace na šetřené lokalitě. Základem vytvořené koncepce je rozčlenění ekonomického modelu na moduly, z nichž každý postihuje dílčí, specifickou část technologického postupu.

Koncepce ekonomického modelu sanace byla naplněna zpracováním základních modulů systému pro přípravné a projektové práce, laboratorní práce, vrtné práce a dokončovací práce po ukončení sanace. Pro specifický technologický postup byl v prvním kroku řešen model technologie neutralizace ex situ. Kromě toho byly rozpracovány nákladové modely dalších technologických postupů (oxidace, venting) a jsou připraveny další sanační metody ke zpracování.

Problematikou managementu procesu sanace se zabývá část věnovaná manažerskému účetnictví, která přináší některé náměty na strukturu účtů v rámci evidence sanačních procesů. Smyslem těchto zásahů do účetní evidence je vyprecizovat nákladový model v takové struktuře, která by umožnila bezprostřední řízení jednotlivých zakázek sanace.

Návrh dalších prací

Zpracování návrhu algoritmu pro hodnocení ekonomiky vybraných sanačních technologií zahrnující časovou návaznost jednotlivých kroků. Ověření správnosti navrženého algoritmu na zvolených modelových případně i reálných úlohách pomocí sešitu Excel-MS. Implementace algoritmu ve vhodném programovacím jazyku. Tvorba a trvalé doplňování databáze ekonomického hodnocení jednotlivých sanačních kroků.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize			Strana (celkem)
	0	1	2 3	36 (50)

Návrh nové struktury sekce Modelování

Návrh na novou organizaci úkolů a oddělení sekce Modelování spočívá ve zrušení úkolu výzkumu metod kalibrace a verifikace modelů jako samostatného úkolu. Naše zkušenosti ukazují, že obecný výzkum v této oblasti je velmi obtížně uplatnitelný při kalibraci modelů reálných úloh. Postup při kalibraci je výrazně závislý na dostupnosti dat charakterizující horninové prostředí a výsledků měření a monitorování modelovaného procesu. Zkušenosti ukazují též na skutečnost, že postup je velmi závislý i na zvoleném procesu a postup pro kalibraci modelu proudění bude odlišný od postupu kalibrace transportních procesů a výrazně odlišný od postupu při kalibraci silně nelineárních a velmi citlivých modelů chemických interakcí. Proto náš návrh směřuje k plnění tohoto úkolu v rámci modelování jednotlivých procesů. Na druhé straně původní návrh úkolu výzkumu modelů transportu, který zahrnuje i chemické reakce vyžaduje kompletaci mnoha modulů se značně heterogenními vlastnostmi. Proto navrhujeme oddělení těchto úkolů a jejich výzkum řešit v základní fázi odděleně a po té v rámci komplexních projektů výsledky propojit. Výzkumné práce navrhujeme strukturovat do následujících úkolů:

M-1: Výzkum a implementace modelů proudění podzemních vod

M-2: Výzkum a implementace modelů transportu látek v horninovém prostředí

M-3: Výzkum a implementace modelů chemických reakcí v horninovém prostředí

M-4: Výzkum metod pro řešení rozsáhlých řídkých systémů lineárních rovnic

M-5: Vývoj preprocesorů a postprocesorů pro přípravu dat a grafické výstupy

M-6: Výzkum metod a nástrojů pro hodnocení následků nebezpečných událostí

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize			Strana (celkem)
	0	1	2 3	37 (50)

IV SEKCE INFORMATIKY

Zodpovědný řešitel: *Július Štuller*

Na řešení se podíleli: *Július Štuller, Roman Špánek, Martin Řimnáč, Zdeňka Linková, Zuzana Capeková*

Sekce Informatiky je zaměřena na zajištění infromatických potřeb všech sekcí centra. Tato sekce je řízena Ústavem informatiky AV ČR a do úkolů jsou zapojováni i pracovníci centra z TUL. Sekce zahrnuje práce ve dvou směrech, definovaných v samostatných výzkumných úkolech, a to:

I-1: Zajištění komunikace mezi sekcemi, předávání výsledků a koordinaci činností

I-2: Návrh a implementace technologií sémantického webu a moderních databázových technologií

V první etapě řešení (2005-2006) byly uvedené dva úkoly propojeny a zaměřeny na návrh struktury webového portálu a jeho implementaci. Správa webového serveru a doplnění jeho informační struktury je trvalým úkolem sekce. Vzhledem k dosaženým výsledkům v ostatních sekcích budou pracovníci této sekce plnit v budoucnu i úkoly návrhu struktury databází.

1 Zajištění komunikace mezi sekcemi, předávání výsledků a koordinaci činností

Tento úkol byl, jak je výše uvedeno, v první etapě těsně propojen s druhým úkolem a tedy zaměřen na návrh a implementaci webového portálu centra s řadou funkcí (vybrané z nich jsou popsány níže). Plnění tohoto úkolu zahrnuje i přípravu publikace výsledků centra za první dva roky řešení, která bude připravována v závěru roku a bude doplňovat tento přehled prací centra.

Návrh dalších prací

Další úkoly sekce budou směřovat k návrhu a implementaci vhodných databází výsledků laboratorních i terénních měření a výsledků monitorování sledovaných procesů. Z tohoto hlediska se očekává užší propojení sekce Informatiky se sekcí Horninového prostředí v souvislosti s plněním databáze GIS a ve spolupráci s oddělením vývoje preprocesorů i přípravu datových souborů pro modely. Dále budou v rámci tohoto úkolu zpracovány databáze výsledků jednotlivých oddělení sekce Speciální technologie. Konečně bude sekce připravovat databáze i pro shromáždění dat hodnocení ekonomických následků ekologických zátěží a havárií. Tedy se předpokládá těsné propojení této sekce se 6. oddělením sekce Modelování. Následně bude sekce hledat možné spolupráce na projektech EU a zapojení do sítí obdobných výzkumných ústavů.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	38 (50)

2 Návrh a implementace technologií sémantického webu a moderních databázových technologií

Jedním z hlavních dlouhodobých cílů informatické sekce je zajištění informatických potřeb pro ostatní sekce centra. Ty jsou pokryty vytvořením a následnou správou webového portálu včetně databáze a uživatelské podpory. Webový portál jako takový jednak prezentuje výzkumné centrum u široké veřejnosti a zároveň poskytuje informatické zázemí pro řešitelský tým centra.

Na základě požadavků a konzultací byla v prvním pololetí administrační část rozšířena o následující nové moduly:

- **Moje centrum**, které slouží jako úložiště dokumentů centra. Hlavním úkolem tohoto modulu je zprostředkovat výměnu dokumentů v rámci sekcí, centra či široké veřejnosti a také umožnit použití dokumentů jako příloh (např. k úkolům, publikacím). Celý modul je řešen jako otevřená architektura, kde uživatelé mají volnost při vytváření a sdílení dokumentů s tím, že je jim garantována vysoká úroveň zabezpečení. Zabezpečení je založené na členství uživatelů v sekcích a také na základě přidělených rolí.
- **Hlasování**. Modul hlasování umožňuje hlasovat členům centra o důležitých dokumentech pomocí internetového prohlížeče v podstatě z libovolného místa, kde je dostupné internetové připojení. V současné době je modul užíván pro hlasování radních centra tím, že se počítám s rozšířením i pro další členy centra.
- **Správa úkolů centra**. Modul pro správu úkolů, který nahrazuje papírové formuláře elektronickými a umožňuje jednotlivé úkoly dále hierarchicky dělit. Tento modul by měl vytvořit hlavní, jednotný, ale současně distribuovaný nástroj pro řízení, evidenci a kontroly činnosti v rámci centra a to od nejvyšší až po nejnižší úroveň aktivit centra. V prvním kroku je vytvořena hierarchická struktura úkolů, podúkolů a dílčích cílů, dle odsouhlasených zadání. Následně mají odpovědní řešitelé přístup k této struktuře a mohou připojovat zprávy k jednotlivým úkolům.

Díky od počátku systematicky budované modulární struktuře celého systému a existující návaznosti některých modulů byly dále aktualizovány za minimálních nároků na čas následující moduly:

- Publikace – presentace publikací v rámci centra a pro širokou veřejnost,
- základní balík knihoven.

V druhém pololetí došlo k těmto úpravám:

- drobné modifikace některých modulů (správa publikací),
- nové systémové knihovny k přehledovému zobrazování dat, následně použité pro presentaci přehledů o postupu řešení úkolů,
- oddělení publikací vznikajících v rámci centra od publikací prezentovaných v rámci akcí pořádaných centrem.

V neposlední řadě zmiňme ještě uživatelskou podporu. S rostoucím počtem uživatelů využívajících služeb portálu centra rostou i požadavky na konzultační činnost, proto bylo provedeno několik školení ohledně administrace úkolů pro vedoucí sekcí a mnohé

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	39 (50)

individuální konzultace napříč sekcemi centra. Důležitým úkolem druhého pololetí bylo také efektivně nastartovat celý systém a vymezení pravomocí atd.

Návrh dalších prací

Průběžným úkolem je správa a trvalé doplňování funkcionality webového portálu centra podle požadavku vedení, zlepšování uživatelské přívětivosti a pomoc při zveřejňování výsledků řešení ostatních sekcí.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	40 (50)

V UPLATNĚNÉ VÝSLEDKY APLIKOVANÉHO VÝZKUMU

1 Matematické modelování pohybu fluid v puklinovém prostředí testovací lokality

Na řešení se podíleli: Jiřina Královcová a kolektiv

Tento úkol je řešen jako zakázka pro Českou geologickou službu. Zpráva se zabývá implementací dvou konkrétních modelů, které byly inspirovány terénními a výzkumnými pracemi prováděnými na oblasti melechovského masivu. První model simuluje vybranou vodní tlakovou zkoušku realizovanou na jednom z podzemních vrtů. V rámci provedeného experimentu byl v jisté části vrtu udržován konstantní přetlak a sledována spotřeba vody a vzestup hladiny v testovaném i sousedním vrtu. Druhý model simuluje proudění v širší oblasti (o rozloze zhruba 40 km²).

Pro každý ze zmíněných modelů zpráva shrnuje základní postupy sledované při přípravě vstupních dat modelu (modelová síť, fyzikální vlastnosti prostředí, okrajové podmínky, sousednosti elementů). V obou případech bylo využito možností kombinovaných sítí (s kombinací 2D a 3D elementů) s kompatibilním propojením elementů různé dimenze. Výsledky jsou prezentovány převážně v grafické podobě. V případě simulace reálného experimentu je uvedeno srovnání výsledků simulací s experimentálně změřenými hodnotami.

2 Modelování hydrogeologických situací v oblasti Cajamarca

Na řešení se podíleli: Jiřina Královcová a kolektiv

Tento úkol je řešen jako zakázka pro Aquatest a.s. Zpráva podává přehled problematiky spojené s modelováním podzemního proudění v oblasti Cajamarca. Jedná se o vysokohorskou oblast v severní části Peru s rozsahem nadmořských výšek od 2500 do 3500 m. Geologie oblasti je charakteristická především vrstevnatou strukturou sedimentovaných vrstev hornin, které byly v minulosti zvrátněny a narušeny. Na oblasti se nachází několik výrazných zlomů – a to především východo-západní násuvný zlom a soustava severo-j jižních zlomů. V zájmové oblasti se nachází dva významné termální prameny na jejichž formování se výrazně podílí S-J zlom, který se v místě vývěru kříží s osou antiklinály.

Na základě geologických a hydrogeologických poznatků o modelované oblasti byla nejprve připravena síť – jejím specifickým je jednak propojení objemových (hydrogeologické vlastnosti hornin) a plošných prvků (zlomy) a dále orientace pouze na propustné vrstvy hornin. Pro generovanou síť byla dále vytvořena sada vstupních souborů – soubor hydraulických vlastností prostředí, soubor okrajových podmínek, soubor sousedností elementů a provedeny simulační výpočty.

Zpráva seznamuje stručně se podstatnými charakteristikami modelovaného regionu a se způsobem zadávání jednotlivých vstupních dat modelu. Dále jsou prezentovány základní výsledky provedených simulací. Nastíněny jsou rovněž možné pokračující práce.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	41 (50)

3 Výzkum procesů pole blízkých interakcí hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů

Na řešení se podíleli: Milan Hokr a kolektiv

Tento úkol je řešen jako zakázka pro Ústav jaderného výzkumu Řež, v rámci konsorcia „Blízké pole“ pro Správu úložišť radioaktivních odpadů ČR. V roce 2006 byly řešeny tyto úkoly:

Ad 1) Zpráva popisuje testování použitelnosti výpočetního softwaru ANSYS pro modelování mechanických vlastností inženýrské bariéry v podzemním úložišti. Jsou realizovány dva typy úloh. První z nich je model vlivu bobtnacího tlaku na vlastnosti puklin, druhou je model vtláčení bentonitu do puklin. Vstupními daty jsou geometrické a materiálové charakteristiky úložiště a inženýrské bariéry. Pro řešení je použito nativního prostředí ANSYS a nového prostředí ANSYS Workbench. Výsledkem jsou rozložení mechanických veličin ve sledovaném prostředí.

Ad 2) Řešena je úloha vedení tepla v prostoru hlubinného úložiště, použit je software ANSYS. Je využita periodická symetrie, oblast řešení zahrnuje polovinu vzdálenosti mezi chodbami, polovinu vzdálenosti mezi vrty a čtvrtinu obalového souboru. Vstupní data jsou použita dle podkladů dodaných ÚJV. Bylo vypočteno rozložené teploty v prostoru a časový vývoj teploty na rozhraních obalový soubor-bentonit a bentonit-granit.

Ad 3 a 4) Rešerše čerpaly ze zpráv institucí zabývajících se ukládáním jaderného odpadu v zahraničí SKB, SKI, NAGRA, US DoE, NEA, z publikací vědeckých konferencí (GeoProc, CLUSTER), výsledky mezinárodních výzkumných projektů, dokumentace k softwarovým kódům pro modelování. Výsledné hodnocení lze stručně shrnout tak, že nejlepší shoda modelování s experimenty je pro tepelné procesy, horší situace je pak pro hydraulické a mechanické, kde se nejvíce projevuje vliv nepřesných empirických vztahů, vzájemných THM vazeb a špatná dostupnost vstupních dat. Rešerše byla dále zaměřena na charakteristiky a dostupnost simulačního software.

Ad 5) Byl proveden pilotní výpočet termoplastického pole pro modelovou úlohu tří kontejnerů a jedné chodby s využitím symetrie (předpokládá se že vliv okraje úložiště odezní u třetí řady). Použit byl simulační kód vyvinutý na Ústavu geoniky AV ČR, založený na metodě konečných prvků, předpodmínění pomocí aditivní Schwarzovy metody s překrytím, implementovaný pro stanice s paralelním multiprocesorem v prostředí MPI a OpenMP.

4 Modelování termo-hydro-mechanických dějů v bentonitu

Na řešení se podíleli: Milan Hokr a kolektiv

Pro hlubinná úložiště nebezpečných odpadů se plánuje využití izolačního lůžka z lisovaného bentonitu pro zabránění vyplavení těchto odpadů z bezpečnostních kontejnerů podzemní vodou. Filtrační proudění podzemní vody, změny fáze, chemické reakce a mechanické namáhání bentonitového lůžka, skalního masivu a samotných kontejnerů včetně tepelného namáhání teplem generovaným uloženým odpadem představují současný Termo-Hydro-Mechanicko-Chemický (THMC) proces. Výše popsany problém je komplexní a není v současné době řešitelný v celé šíři. Mnoho vědeckých týmů z celého světa zkouší řešit tento

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	42 (50)

problém. Každý z těchto týmů zkouší odlišný způsob zjednodušeného přístupu (např. zjednodušení na 1D úlohy).

Náš tým si zvolil přístup založený na trojdimenzionální úloze se zjednodušením pouze provázaného vedení tepla a transportu vlhkosti se sorpcí (TH proces). Hlavní část práce byla věnována odvození modelu na bázi metody konečných prvků. Pro prostorovou diskretizaci byly použity čtyřstěny s lineárními bázovými funkcemi. K časové diskretizaci bylo využito implicitní schéma, pro jeho dobrou stability pro širokou škálu časových kroků. Speciální pozornost byla věnována řešení rozsáhlých, nesymetrických, strukturovaných soustav lineárních rovnic v implementaci numerického modelu.

Byl vytvořen model experimentu *GT40* ze zprávy *Benchmark THM 1.2*. Vypočtené výsledky s výsledky naměřenými vykazují dobrou shodu. Model dosáhl požadovaného cíle, postihnout vlastnosti chování při procesu současného vedení tepla a vlhkosti včetně sorpce/desorpce.

5 Tvorba programového nástroje pro automatickou kalibraci koeficientů hydraulické vodivosti a rešerše automatických generátorů sítí

Na řešení se podíleli: Jan Šembera a kolektiv

Řešení úkolů bylo zahájeno na základě objednávek TÚU, DIAMO, s. p. z července 2006 a jde o první dílčí kroky v dlouhodobějším vývoji softwarových nástrojů pro podporu modelování proudění podzemní vody. Výsledky prací budou předány TÚU na konci listopadu 2006. Výsledkem prací v roce 2006 bude výpočetní jádro kalibračního softwaru, rešerše triangulačního softwaru a návrh postupu dalších prací.

6 Expertní systém pro řízení podzemních zásobníků plynu

Na řešení se podíleli: Otto Severýn a kolektiv

Podzemní zásobníky plynu (PZP) jsou složité systémy, ve kterých se prolínají přírodní, technické a ekonomické procesy a proto je jejich řízení náročné a vyžaduje aplikaci moderních technologií. Projekt Expertního Systému (ES) je zaměřen na implementaci těchto technologií v oboru podzemního skladování zemního plynu. Cílem je vytvoření systému, který bude propojovat řídicí systém technologie všech provozovaných PZP, centrální databázi, vlastní rozhodovací jádro ES, numerické modely podzemní a nadzemní části zásobníku a obchodní a technický dispečink plynárenské sítě. Výstupem ES budou návrhy optimálních scénářů těžby resp. vtlačení jednotlivých skladovacích objektů při respektování okamžitých požadavků dispečinku, stavu PZP a momentálních provozních omezení.

Řešení projektu začalo koncem roku 2004 pilotní fází na lokalitě PZP1. V roce 2005 probíhalo řešení pilotní fáze. V roce 2006 byly v rámci spolupráce RWE Transgas net a TU Liberec provedeny následující práce: Odladění modelu nadzemní části PZP1, propojení modelů nadzemní a podzemní části PZP1 a odladění tohoto spojeného modelu. Dále byly vytvořeny a částečně odladěny modely nadzemních částí PZP2 a PZP3 a propojeny s příslušnými modely podzemí.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	43 (50)

Podkladem pro vytváření zmíněných modelů jsou data o parametrech technologií jednotlivých PZP a jejich uspořádání. Modely byly kalibrovány na provozních datech z těžební sezóny 2005/2006, tak aby bylo dosaženo shody mezi měřenou a simulovanou tlakovou ztrátou na jednotlivých plynovodech a technologiích tak, aby model bylo možno používat pro predikce.

Výstupem řešení projektu jsou uvedené modely, které jsou v současné době již používány v režimu testovacího provozu. Dále byl projekt expertního systému prezentován formou ústního příspěvku na dvou mezinárodních konferencích (World Gas Conference 2006 v Amsterdamu a New Knowledge in the Area of Drilling, Production, Transport and Storage of Hydrocarbons 2006 v Podbánském).

7 ČEZ, a.s. - Jaderná elektrárna Dukovany

Na řešení se podíleli: Pavel Fuchs a kolektiv

Předmětem prací je technická pomoc v oblasti spolehlivosti. V rámci každoročního vyhodnocení poruchovosti bezpečnostně důležitých subsystémů systému kontroly a řízení (SKŘ) byly zpřesněny hodnoty bodových odhadů intenzity poruch komponent a zpracována zpráva předkládaná Jadernou elektrárnou Dukovany Státnímu úřadu pro jadernou bezpečnost. Zpráva hodnotí poruchovost komponent a subsystémů, kvantifikuje parametry spolehlivosti komponent a vybraných funkcí SKŘ se vztahem k jaderné bezpečnosti. Na základě těchto vyhodnocení je statisticky sledován stav (resp. stárnutí) bezpečnostně důležitých subsystémů SKŘ a připravován plán preventivní údržby tohoto zařízení.

V rámci rutinní technické pomoci byl prováděn dozor nad kvalitou zpracování dat zadávaných do informačního systému Jaderné elektrárny Dukovany. Současně byly podávány a realizovány návrhy na úpravy sběru dat (číselníky údržby, kódy poruch a další).

8 Spolehlivost a bezpečnost provozu v České rafinérské, a.s.

Na řešení se podíleli: Pavel Fuchs a kolektiv

Činnost pracovníků Centra v rafinérii Kralupy se týkala technické pomoci v oblasti managementu spolehlivosti a rizik. Na základě metodik Společnosti Shell vedli pracovníci Centra analytický tým zabývající se optimalizací údržby na základě metodiky S-RCM. Analýzy jsou prováděny aplikačním softwarem dodaným společností Shell a výstup analýz je implementován přímo do systému řízení údržby.

Práce v rafinérii Litvínov byly zaměřeny na technickou pomoc do oblasti zlepšení procesů mající přímý vliv na spolehlivost a bezpečnost provozu. Proto byla postupně analyzována korektnost hlášení o mimořádných událostech s ohledem na podíl lidského faktoru, úroveň zpráv komise vyšetřující závažné mimořádné události. Cílem je zvýšit úroveň spolehlivosti změnou způsobu řízení na manažerské úrovni formou kvantitativního vyhodnocování procesů, které mají zásadní vliv na spolehlivost (zavedení zpětné vazby). Dále se připravuje zpracování tzv. Studie proveditelnosti na dodavatelský způsob údržby rotačních stojů majících klíčový význam pro spolehlivost provozu rafinérie Litvínov a rafinérie Kralupy.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	44 (50)

9 Posouzení efektivnosti alternativních zdrojů energie

Na řešení se podíleli: Markéta Dubová a kolektiv

Snahou České republiky posledních let v oblasti energetiky je intenzivnější využívání výroby elektrické energie z obnovitelných zdrojů. Hlavním realizátorem této snahy je v ČR společnost ČEZ Obnovitelné zdroje. Její prioritou v současné době jsou investice zejména do větrné energie. K posouzení efektivnosti investice do těchto projektů je třeba analyzovat řadu technologických, technických a ekonomických parametrů. K realizaci zamýšleného projektu v českých podmínkách je třeba navíc uvažovat s podmínkami legislativními, právními i ekonomickými, jež jsou platné v České republice.

K posouzení a syntéze těchto hledisek byl vyvinut ve spolupráci se zmiňovanou společností ČEZ Obnovitelné zdroje model ekonomického projektu větrné elektrárny. Cílem tohoto modelu je soustředit údaje potřebné k posouzení ekonomické efektivnosti předpokládané investice do výstavby větrné elektrárny. Model by měl sloužit jako pružný, operativní a praktický nástroj, který dokáže na základě zadání základních charakteristik zamýšlené investice a parametrů stávajícího ekonomického prostředí vyhodnotit všechny potřebné ukazatele ekonomické efektivnosti a návratnosti investice s analýzou citlivosti získaných výsledků.

Hlavní částí vytvořeného modelu VTE je modul výpočtu cash flow VTE. Tato část modelu byla vypracována tak, aby zohlednila pokud možno co nejvíce faktorů, jež ovlivňují finanční toky, související s projekty větrných elektráren, v časovém horizontu předpokládané životnosti elektrárny. Těmito faktory jsou zejména:

- vývoj na trhu elektrické energie,
- časová hodnota peněz,
- vývoj kapitálové struktury investora,
- očekávaný vývoj inflace,
- vývoj daňové politiky státu,
- situace na finančním trhu.

Po nezbytných výpočtech příjmů a kapitálových výdajů v jednotlivých letech životnosti předpokládané investice následují modelové výpočty kritérií, jež jsou základem pro rozhodování o efektivnosti této investice. Hlavními kritérii pro hodnocení investičních variant VTE zadaných uživatelem jsou:

- čistá současná hodnota,
- doba návratnosti zohledňující časovou hodnotu peněz,
- vnitřní výnosové procento,
- vývoj měrných nákladů v Kč/kWh.

Zpracovaný model větrné elektrárny, který je obecně aplikovatelný na podmínky České republiky, není uzavřeným systémem. Počítáme s jeho aktualizací podle měnících se ekonomických podmínek v ČR, případně s úpravou modelu podle požadavků a pokynů uživatele.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	45 (50)

10 Výchova doktorů v doktorském studijním programu P2612 Elektrotechnika a informatika ve studijním oboru „Přírodovědné inženýrství“

V letech 2005-2006 dokončili studia v doktorském studijním programu obhajobou disertační práce tématicky vycházející z řešených úkolů výzkumného centra následující absolventi:

Jméno absolventa	Školitel	Termín konání obhajoby	Název disertační práce
Ing. Štěpán Papáček Ph.D.	Prof. Dr.Ing. Jiří Maryška, CSc.	15.9.2005	Fotobioreaktory pro kultivaci mikrořas za vysoké ozáření: modelování, simulace a návrh.

V doktorském studijním programu studují v současnosti následující studenti, jejichž rámcové téma disertační práce tématicky vychází z řešených úkolů výzkumného centra:

Jméno studenta	Školitel	Rámcové téma disertační práce
Ing. Michal Balatka	Ing. Hana Čermáková, CSc.	Management ekologických rizik likvidace chronických zátěží
Ing. Zuzana Capeková	Ing. Július Štuller, CSc.	Vizualizace v databázích
RNDr. Klára Císařová	Prof. Dr. Ing. Jiří Maryška, CSc.	Hodnocení citlivosti reálných hydrogeologických modelů pro účely kalibrace
Ing. Jana Ehlerová	Doc. Ing. Josef Šedlbauer, Ph.D.	Modelování sanačních procesů v horninovém /půdním/ prostředí
Ing. Jitka Felcmanová	Doc. Ing. Josef Šedlbauer, Ph.D.	Počítačové modelování geochemické interakce voda-hornina
Ing. Jiří Havlíček	Ing. Milan Hokr, Ph.D.	Modelování interakce podzemní a povrchové vody na základě detailního popisu jevů v nenasycené zóně
Ing. Jiří Hnídek	RNDr. Pavel Satrapa, Ph.D.	Počítačová grafika
Ing. Josef Chudoba	Ing. Pavel Fuchs, CSc.	Dynamické modelování spolehlivosti
Ing. Pavel Jiránek	Doc. Dr. Ing. Miroslav Rozložník	Analýza a implementace nesymetrických iteračních metod pro řešení rozsáhlých indefinitních problémů
Mgr. Kateřina Jurková	Prof. Ing. Miroslav Tůma, Csc.	Řešení rozsáhlých soustav lineárních rovnic se zaměřením na techniky, které jsou motivovány aplikačními problémy
Ing. Jan Kamenický	Ing. David Vališ, Ph.D.	Modelování spolehlivosti dynamických systémů
Mgr. David Kmoch	RNDr. Pavel Satrapa, Ph.D.	Propustnost a výkonnost distribuovaných výpočetních systémů

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	46 (50)

Ing. Jaroslav Nosek	Dr. Ing. Miroslav Černík, CSc.	Vývoj metodiky modelování transportních procesů v puklinovém prostředí s výrazně heterogenní strukturou
Ing. Martin Plešinger	Prof. Ing. Zdeněk Strakoš, DrSc.	Analýza numerických vlastností metod v matematickém modelování
Ing. Tomáš Pluhař	Dr. Ing. Miroslav Černík, CSc.	Matematický popis sorpce na přírodních materiálech pomocí optimalizačních metod
RNDr. Lenka Rukavičková	Doc. RNDr. Tomáš Pačes, DrSc.	Vývoj metodiky hydraulického testování rozpukaného masivu s využitím numerické simulace
Ing. Roman Špánek	Ing. Július Štuller, Csc.	Mobilní databázové systémy – modely a nástroje
Ing. Petr Tomek	Ing. Jan Šembera, Ph.D.	Konvekčně-reakčně-difúzní rovnice a jejich využití v modelování technologických procesů
Ing. David Tondr	Ing. Otto Severýn, Ph.D.	Vývoj metodiky pro kalibraci a verifikaci modelů v reálném geologickém prostředí
Ing. Lukáš Vodnárek	Ing. Hana Čermáková, CSc.	Sanace starých zátěží s ohledem na posouzení ekologických rizik a ekonomickou efektivnost sanace

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	47 (50)

Závěr

V prvních dvou letech existence Centra ARTEC byla soustředěna výzkumná kapacita pracovníků centra na řešení úkolů v sekcích. Jak je doloženo v části V této zprávy, některé výsledky výzkumu byly již uplatněny v průmyslové praxi. Snahou vedení Centra v následujícím období bude větší propojení výsledků dosažených v sekcích a zaměření řešitelských kapacit především na komplexní projekty. Pracovní úkoly sekcí pak budou zaměřeny na ty výzkumné činnosti, které pro řešení komplexních projektů budou vyžadovány, a které budou podpořeny navazujícími projekty nebo smlouvami o dílo.

První komplexní projekt zaměřený na výzkum nových sanačních technologií a jejich ověřování na konkrétních lokalitách pro příští rok předpokládá pokračování v optimalizaci jednotlivých sanačních technologií, testování účinnosti na konkrétní lokalitě a testování povrchově upravených nanostrukturovaných materiálů (filtrů) v kolonových experimentech. Úkoly budou řízeny sekcí Speciální technologie a činnost bude propojena s úkoly sekce Modelování. Cílem je vypracovat databázi časových řad výsledků sanace, stanovit účinnost jednotlivých sanačních strategií, modelově hledat takové podmínky, které usměrní probíhající procesy tak, aby se sanační technologie efektivně „potkávala“ s kontaminátem v pásmech koncentrací s vysokou účinností. Nanostrukturované materiály, jako jsou vláknenné filtry s povrchovou úpravou jako imobilní respektive nanoželezo jako mobilní, skýtají velké možnosti ve zvýšení účinnosti v souvislosti s vysokým měrným povrchem. Další výzkum bude zahrnovat jak technologie přípravy těchto materiálů, tak i funkční povrchové úpravy a řešení jejich dlouhodobé stability.

Druhý komplexní projekt zaměřený na výzkum uplatnění nových technologií v prostoru sanace chemické těžby uranu ve Strážském bloku a ověřování jejich efektivity bude soustředěn na ověření možností imobilizace kontaminace in situ a simulaci vývoje aplikace této technologie v dlouhodobém měřítku. Z tohoto důvodu byl na příští rok plánován úkol vypracování modelu mezikolektorového transportu látek pro hodnocení potenciálního rizika ovlivnění turonské zvodně. Ověření účinnosti a stability imobilizace je však v DIAMO s.p. plánován až na rok 2009 a tedy nezasáhne do období řešení projektu centra. Z uvedeného důvodu bude spolupráce probíhat na úrovni dílčích projektů sekce Horninové prostředí a sekce Modelování. Komplexní projekt bude zaměřen i na jiné kontaminované lokality. Nabízí se možnost připravit projekt řešící problematiku revitalizace území po povrchové těžbě s cílem ověřit rizika navrhovaných strategií. V tomto směru chceme vést jednání s potenciálními partnery ještě v závěru tohoto roku.

Třetí komplexní projekt řeší úkoly spojené s výběrem lokalit pro hlubinná úložiště nebezpečných odpadů a pro rok 2007 byla plánována příprava modelu úložiště radioaktivního odpadu se zahrnutím geologických a hydrogeologických dat připravených v rámci souvisejících projektů. Úkol bude řešen ve spolupráci sekcí Horninové prostředí a Modelování. Na tento projekt bude zpracována zadávací dokumentace specifikující dílčí úlohy a ta bude předložena SURAO pro výběrové řízení v rámci programu studia vzdálených interakcí hlubinných úložišť. Tento projekt byl připraven ve spolupráci s ČGS a ÚJV Řež a.s. již v tomto roce, ve výběrovém řízení zvítězil, ale to bylo po stížnostech konkurenčních projektů v červnu 06 zrušeno. Předpokládáme, že výběrové řízení bude vypsáno na počátku roku 2007. V současnosti probíhají práce na řešení projektu blízkých polí hlubinného úložiště společně s ÚJV Řež, VŠCHT, CEG ČVUT a FJFI ČVUT. V příštím roce chceme na těchto úkolech více propojit činnost sekcí Horninového prostředí a Modelování s cíle zpracování

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	48 (50)

výsledků předcházejících projektů do informačních databází a jejich uplatnění při stavbě a implementaci podrobných modelů.

Konečně čtvrtý komplexní projekt je zaměřen na výchovu odborníků schopných řešit problémy spojené s aplikací environmentálních technologií. Tento úkol je řešen průběžně. Každoročně je do doktorského programu v oboru přírodovědné inženýrství přijímáno 5 až 7 studentů. Předpokládáme, že v příštím roce budou obhajovat svoji disertační práci asi tři doktorandi a proběhne habilitační řízení se čtyřmi pracovníky centra.

V následující etapě bude sekce Horninového prostředí pokračovat v rámci řešení jednotlivých úkolů terénními měřeními, odběrem vzorků pro chemické analýzy a vyhodnocením dostupných dat s cílem doplnit databázi GIS daty a podklady nezbytnými pro tvorbu, kalibraci a verifikaci matematických modelů proudění podzemních vod a transportu. Na rozšiřování a plnění databází bude sekce spolupracovat se sekci Informatika. Na lokalitě Pozďátky bude zpracován návrh dalšího postupu při likvidaci skládky a zajištění ochrany prostředí v průběhu a po likvidaci. Výsledky výzkumu budou nabídnuty majiteli skládky k využití pro další rozhodování o osudu skládky v rámci smlouvy o dílo. Podobně i pro úkol acidifikace lesních půd bude nutné hledat konkrétní využití výsledků. Pokud tohoto nebude dosaženo, bude nutné výzkumnou kapacitu přeměřovat a soustředit na výzkumné práce pro nové sanační technologie. Významným úkolem sekce bude i zpracování několika variant geochemických modelů popisujících chování látek rozpuštěných v podzemních vodách v průlomových a puklinových systémech a jejich interakci s horninovými látkami (zrny, puklinovou výplní a podobně). V roce 2007 bude přebírána a zpracována další série vrtných dat z ČGS-Geofondu pro modelový výzkum revitalizace území dotčených těžebními aktivitami. Na tomto úkolu bude též spolupracovat i sekce Informatiky.

Sekce Speciální technologie bude pokračovat v plánování a realizaci experimentální činnosti jak v laboratorních tak i terénních podmínkách s cílem hodnocení jednotlivých postupů a technologií z hlediska účinnosti i ekonomických nákladů. Ve spolupráci se sekci Informatiky bude navržena a postupně plněna databáze výsledků hodnocení efektivnosti nasazení technologií v různých horninových podmínkách. Úkolem sekce je i zapojení centra do sanačních zakázek, v nichž budou námi zkoumané technologie nasazeny. Významná řešitelská kapacita bude nasazena na přípravu nanostrukturovaných materiálů a jejich povrchovou úpravu s cílem zvládnutí těchto technologií pro průmyslové aplikace. Na řadě úkolů bude tato sekce spolupracovat s dalšími výzkumnými institucemi.

Sekce Modelování bude soustředěna na stavbu a implementaci modelů pro konkrétní lokality pro posouzení predikce chování ložiska v průběhu a po sanačních aktivitách. Tedy modely budou připravovány pro granitové prostředí (s charakteristikami danými výzkumem v Potůčkách a melechovském masívu) s cílem postavit hypotetické úložiště radioaktivního rozpadu, pro oblasti Strážského bloku a hnědouhelného revíru, lokalitu Kuřívod a další oblasti, na kterých probíhá ověřování sanačních technologií. Samozřejmě v našem zájmu budou i další regiony, pro které centrum získá zakázky. Pro tyto lokality budou připravovány databáze informací pro přípravu a naplnění modelů. Ze stejného důvodu budou i modely chemických reakcí stavěny pro vybrané lokality a není tedy naším cílem stavba modelů obecných a vše zahrnujících. Podobně i výzkum numerických metod pro řešení odvozených stavových rovnic bude zaměřen především na aplikace řešičů pro konkrétní soustavy. Cílem sekce tedy není obecný výzkum procesů. I pro hodnocení rizik a nákladů jednotlivých technologií budou další cíle omezeny na hodnocení kontaminací a technologií zkoumaných v centru. Kalibrace a verifikace jednotlivých modelů budou řešeny samostatně vždy v těsné

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	49 (50)

vazbě na danou lokalitu, protože užití a výsledky obecných metod nedosahují dobré shody se skutečností a lze je uplatnit pouze pro lokality s velkým množstvím experimentálních dat. Proto je v této sekci navržena i změna struktury dílčích úkolů.

Sekce Informatiky bude směřovat k návrhu a implementaci vhodných databází výsledků laboratorních i terénních měření a výsledků monitorování sledovaných procesů. Dojde i k užšímu propojení sekce Informatiky se sekci Horninového prostředí v souvislosti s plněním databáze GIS a ve spolupráci s oddělením vývoje preprocesorů i přípravu datových souborů pro modely. Sekce bude připravovat databáze i pro shromáždění dat hodnocení ekonomických následků ekologických zátěží a havárií. Konečně bude sekce hledat i možné spolupráce na projektech EU a zapojení do sítí obdobných výzkumných ústavů. Průběžným úkolem je pak správa a trvalé doplňování funkcionality webového portálu centra podle požadavku vedení, zlepšování uživatelské přívětivosti a pomoc při zveřejňování výsledků řešení ostatních sekcí.

Název zprávy: Souhrn provedených prací a výsledků a plán na další období, dílčí zpráva za etapu 2005-2006	Vydání dokumentu - revize	Strana (celkem)
	0 1 2 3	50 (50)