TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

DISERTAČNÍ PRÁCE

Hodnocení numerické citlivosti reálných hydrogeologických modelů pro účely jejich kalibrace

RNDr.Klára Císařová

2007

Místopřísežné prohlášení:

Místopřísežně prohlašuji, že jsem disertační práci vypracovala samostatně s použitím uvedené literatúry

15. 5. 2007

RNDr.Klára Císařová

Poděkování

Ráda bych poděkovala všem, kteří jakýmkoliv způsobem přispěli ke vzniku této práce. Především děkuji svému školiteli profesoru Jiřímu Maryškovi za zajímavé téma, trpělivost při nekonečných konzultacích a hlavně za odbornou pomoc. Děkuji také doktorce Královcové a inženýrce Capekové poskytnuté informace, konzultace a zdroje zpracovaných dat, bez kterých by práce vznikala neporovnatelně delší dobu.

RNDr.Klára Císařová

Anotace

Tato práce se zabývá problematikou citlivosti numerické simulace proudění podzemních vod v lokalitě s velkým nedostatkem vstupních dat. Sadou výpočtů scénářů pro různá zadání okrajových podmínek a hodnocením změn stavových hodnot lze posoudit stabilitu modelu na zadávání vstupních dat. Pro tuto úlohu byla vybrána lokalita Cajamarca v Peru. V této hydrogeologicky velmi komplikované oblasti byly pro stavbu modelu k dispozici pouze geografická data, nákresy několika profilů, hodnoty srážkových dotací a vydatnost několika pramenů. Modelem se mají posoudit hydrogeologické změny v oblasti v případě, že dojde k nucenému čerpání pramenů. Simulací se mají posoudit změny v infiltrační oblasti, změny teploty pramenů a možné snížení kvality vody vlivem kontaminace. Posouzení stability modelu a jeho citlivosti na vstupní data je nutnou podmínkou splnění všech výše uvedených úkolů.

Summary

In this thesis there are discussed problems relating to a sensitivity of numeric simulation of streaming of underground water in the location with the great lack of enters data. To review stability of the model of entering data, herein is used series of calculations of scenarios for different outside conditions in comparison with survey of rates changes of values. Cajamarca in Peru is the location chosen for this task. In this very complex groundwater zone there were for the construction of the model available only: geografical data, drawings of several profiles, rates of rain-fall. The objective of this work is to consider possible hydrogeological changes in the location in case of enforced pumping water resourses. By this simulation we can meussure mutations in infiltrating location, shifts in the temperature of water streams and possible decrease in quality of water owing to contamination. The necessary condition to carry out above described tasks is stability of the model and its responsivness to the enters data.

Obsah

Se	eznam obrázků	7
Se	eznam tabulek	9
Po	oužité značení	10
Ú	vod	11
Ι	Hydrogeologický model	17
1	Matematicko - fyzikální model úlohy ustáleného proudění1.1Odvození slabého řešení1.2Diskretizace modelu užitím MH FEM1.3Algoritmus výpočtu diskrétní soustavy	17 18 19 21
2	Kombinovaný model - propojení prvků různých dimenzí 2.1 Kombinovaný model - ustálené proudění	23 24
II	I Příprava vstupních dat modelu	32
3	Hydrogeologický model Cajamarca 3.1 Geologická stavba oblasti 3.1.1 Druhy hornin 3.1.2 Strukturní stavba 3.1.3 Vztah pozorovaných struktur a hydrogeologických poměru 3.2 Hydrogeologické poměry v oblasti 3.3 Příprava sítě 3.4 Vstupní data modelu 3.4.1 Okrajové podmínky 3.4.2 Fyzikální vlastnosti prostředí 3.4.3 Topologie sítě 3.5 Výsledky počítačového modelu - nulová varianta	$\begin{array}{c} {\bf 32}\\ {\bf 34}\\ {\bf 34}\\ {\bf 34}\\ {\bf 34}\\ {\bf 39}\\ {\bf 42}\\ {\bf 42}\\ {\bf 42}\\ {\bf 44}\\ {\bf 45}\\ {\bf 47}\\ {\bf 48}\end{array}$
II	II Citlivost modelu na změnu vstupních dat	51
4	Vliv změny hodnot hydraulické vodivosti	51
	4.1 Vliv změny hodnot hydraulické vodivosti na celkovou změnu sta- vových veličin	52

	4.2	Vliv změny hodnot hydraulické vodivosti na lokální změny stavových veličin	62
5	Vliv	změny hodnot Dirichletovy okrajové podmínky	64
	5.1	Vliv změny hodnot Dirichletovy OKP na celkové změny stavo- vých veličin	64
	5.2	Vliv změny hodnot Dirichletovy OKP na lokální změny stavových veličin	65
6	Vliv	změny hodnot Newtonovy okrajové podmínky	74
	6.1	Vliv změny hodnot Newtonovy okrajové podmínky na celkové změny stavových veličin	74
	6.16.2	Vliv změny hodnot Newtonovy okrajové podmínky na celkové změny stavových veličin	74 77
Zá	6.1 6.2	Vliv změny hodnot Newtonovy okrajové podmínky na celkové změny stavových veličin	74 77 82

Seznam obrázků

1	Profilový řez oblastí	14
2	Spojení 3D prvků přez 2D prvek	27
3	Spojení 2D prvků přez 1D prvek	29
4	Reliéf krajiny	33
5	Geologická mapa modelované oblasti	37
6	Jeden ze severo-jižních profilů modelované oblasti	38
7	Západo-východní profil modelované oblasti	38
8	Průměrné srážkové dotace v [mm/měsíc] v oblasti Cajamarca	40
9	Průměrné srážkové bilance v oblasti Cajamarca	41
10	Geometrie modelované oblasti	43
11	Síť používaná pro výpočet	43
12	Povrch a modelovaná oblast	44
13	Geometrie modelované oblasti	48
14	Síť používaná pro výpočet	49
15	Síť používaná pro výpočet	49
16	Pole toků při minimální hydraulické vodivosti horniny	53
17	Pole toků při 0-vé variantě hydraulické vodivosti horniny	53
18	Pole toků při maximální hydraulické vodivosti horniny	54
19	Pole tlakových výšek při minimální hydraulické vodivosti horniny	54
20	Pole tlakových výšek při 0-vé variantě hydraulické vodivosti horniny	55
21	Pole tlakových výšek při maximální hydraulické vodivosti horniny	55
22	Změna pole toků při minimální hydraulické vodivosti horniny	56
23	Změna pole toků při maximální hydraulické vodivosti horniny .	56
24	Změna pole tlakových výšek při minimální hydraulické vodivosti	
	horniny	57
25	Změna pole tlakových výšek při maximální hydraulické vodivosti	
	horniny	57
26	Graf závislosti funkce ${\cal G}(U)$ na změnách hydraulické vodivosti	
	horniny	60
27	Graf závislosti funkce ${\cal G}(U)$ na směrových změnách hydraulické	
	vodivosti horniny	60
28	Graf závislosti funkce ${\cal G}(P)$ na změnách hydraulické vodivosti	
	horniny	61
29	Graf závislosti funkce ${\cal G}(P)$ na směrových změnách hydraulické	
	vodivosti horniny	61
30	Graf závislosti vydatnosti pramene na změnu HP	62
31	Graf závislosti vydatnosti pramene na změnách koeficientu pře-	
	stupu mezi 2D a 3D elementy	63
32	Pole toků při minimální hodnotě Dirichletovy OKP	66

33	Pole toků při nulové variantě Dirichletovy OKP	66
34	Pole toků při maximální hodnotě Dirichletovy OKP	67
35	Pole tlakových výšek při minimální hodnotě Dirichletovy OKP .	67
36	Pole tlakových výšek při nulové variantě Dirichletovy OKP	68
37	Pole tlakových výšek při maximální hodnotě Dirichletovy OKP .	68
38	Změna pole toků při minimální hodnotě Dirichletovy OKP	69
39	Změna pole toků při maximální hodnotě Dirichletovy OKP	69
40	Změna pole tlakových výšek při minimální hodnotě Dirichletovy OKP	70
41	Změna pole tlakových výšek při maximální hodnotě Dirichletovy OKP	70
42	Závislost relativní odchylky průtoků při změně Dirichletovy OKP	71
43	Závislost relativní odchylky tlakových výšek při změně Dirichle-	
	tovy OKP	71
44	Graf závislosti vydatnosti pramenů na změnách Dirichletových	
	OKP	73
45	Toky při minimální změně Newtonovy OKP ve srovnání s nulovou	
	variantou	75
46	Toky při maximální změně Newtonovy OKP ve srovnání s nulo-	
	vou variantou	75
47	Tlakové výšky a lokální toky při minimální změně Newtonovy	
	OKP ve srovnání s nulovou variantou	76
48	Tlakové výšky a lokální toky při maximální změně Newtonovy	
	OKP ve srovnání s nulovou variantou	76
49	Změna tlakových výšek a lokálních toků při minimální změně	
N 0	Newtonovy OKP ve srovnání s nulovou variantou	78
50	Změna tlakových výšek a lokálních toků při maximální změně	
~ .	Newtonovy OKP ve srovnání s nulovou variantou	78
51	Graf závislosti funkce $G(U)$ při změně Newtonovy OKP	79
52	Grat závislosti funkce $G(P)$ při změně Newtonovy OKP	79
53	Grat závislosti průtoku pramenů na změně koeficientu přestupu	
	Newtonovy OKP	80

Seznam tabulek

1	Hlavní horninové typy	35
2	Citlivost na změnu HP v $\%$ rovnoměrně ve všech směrech $\ .$	58
3	Citlivost na změnu HP v preferovaném směru $\%$	59
4	Citlivost toků ve vybraných částech sítě na změnu HP	62
5	Vliv změny koeficientu přestupu mezi 2D a 3D elementy na bi-	
	lanci vod v některých částech sítě	63
6	Citlivost na změnu Dirichletovy OKP	72
7	Vliv změny hodnoty Dirichletovy OKP na bilanci vod ve vybra-	
	ných lokalitách	73
8	Citlivost na změnu Nw OKP	77
9	Vliv změny koeficientu přestupu na horním povrchu Chimú na	
	bilanci vod	80

Použité značení

- u filtrační rychlost
- ptlaková výška
- p_T vnější tlaková výška při zadání Newtonovy okrajové podmínky
- p_D tlaková výška podzemní vody při zadání Dirichletovy okrajové podmínky
- π dynamická složka tlaku
- λ stopa tlakové výšky na mezilementových a okrajových stěnách
- ρ hustota vody
- g gravitační konstanta
- σ koeficient přestupu
- Ω oblast řešení
- E_h rozklad oblasti Ω na systém podoblastí
- Γ struktura mezilementových a nedirichletovských stěn
- **R** tenzor hydraulického odporu horninového prostředí
- p_{ad} přidaná tlaková hodnota
- c_{kap} parametrizační konstanta
- ϑ_{ref} střední hodnota teploty povrchu terénu referenční teplota

Úvod

Tato práce se zabývá numerickou analýzou citlivosti kombinovaného modelu proudění aplikovaného v reálném horninovém prostředí v oblasti Cajamarca v Peru.

Modelování a simulace procesů je v současné době jeden z nejúčinnějších prostředků pro pochopení vlastností sledovaných dějů, pro predikci jejich chování v budoucnosti. Kalibrované modely slouží i k posouzení možností jejich řízení. Podmínkou úspěšného řízení procesů je úplné pochopení všech podstatných vlivů, které mění podmínky a tím i vývoj sledovaného děje. V osmdesátých letech minulého století byly úspěchy v uplatnění technologie modelování zaměřeny především na studium technických procesů, optimálního návrhu strojních součástí, hodnocení statiky staveb a podobně. V této době se začala velmi dynamicky vyvíjet i výpočetní technika. V devadesátých letech se vývoj softwaru specializoval na jednotlivé technické disciplíny. Tak vznikly specializované balíky programů jakými jsou například ANSYS specializovaný na technické výpočty v oblasti strojírenství, stavebnictví, tepelné techniky a podobně, FLUENT specializovaný na výpočty proudění plynu v technických systémech. A bylo by možné jmenovat další produkty i pro jiné disciplíny respektive produkty konkurenční. V devadesátých letech řada výzkumných týmů úspěšně aplikovala modely i na řešení přírodních procesů, v oblasti životního prostředí. Mezi nejpoužívaněší komerční softwarové produkty zaměřené na problematiku proudění podzemních vod je program MODFLOW. Tento software je postupně doplňován o zahrnutí dalších fyzikálních vlivů, je vybaven příjemným uživatelským rozhraním včetně grafiky. Proto je také mezi hydrogeology značně oblíben a užíván. Jeho užití pro řízení přírodních procesů je však právě omezeno užíváním vlastností homogenizovaného prostředí, což zkresluje výsledky řešení, ikdyž jejich grafické znázornění může být velmi působivé. Výrazná heterogenita horninového prostředí, přítomností mnoha specifických prvků, velmi obtížná identifikace vstupních parametrů úlohy a řada dalších okolností podstatně komplikují hledání odpovídajícího řešení. Lze říci, že každá reálná úloha s hydrogeologickou tématikou je svým způsobem jedinečná a vyžaduje řadu kvalifikovaných odhadů a předpokladů, jejich následné ověřování a postupnou kalibraci zadaných parametrů. Úspěšnost řešení reálných úloh závisí především na zkušenostech řešitelů a dostupnosti vstupních dat – geometrických, geologických, geofyzikálních, a možnosti měření některých stavových proměnných pro porovnání výsledků. Všechny hydrogeologické úlohy trpí nedostatkem vstupních dat. Přesto jsou oblasti relativně velmi podrobně prozkoumané s velkým množstvím časových řad monitorovaných v průběhu například průmyslové činnosti v dané oblasti. Mezi takové úlohy patří i řešení hydrogeologických situací v průběhu sanace Strážského bloku po chemické těžbě uranu a řada dalších úloh v důlních oblastech.

Například ve Strážském bloku bylo provedeno několik tisíc těžebních, průzkumných i monitorovacích vrtů. Vzhledem k tomu, že zasažený prostor zaujímá asi $25 \ km^2$ a v tomto prostoru je pouze několik set vrtů jádrových a monitorovacích. Tedy i zde se jedná o lokální bodové údaje – v průměru jeden zkoumaný vrt na několik hektarů – a kalibrace a verifikace modelů, porovnávání s monitoringem je pro výsledné řešení nezbytné. Pokud chceme provádět pilotní hydrogeologický výzkum, je situace v identifikaci vstupních dat mnohem složitější. Právě taková oblast byla vybrána pro výzkum citlivosti hydrogeologických modelů vyvíjených na Katedře modelování procesů.

Cíle disertační práce

Postup při tvorbě modelu je následující. Nejprve je zájmová oblast rozdělena do několika tisíc podoblastí – elementů (v našem případě cca 16 000). Na každém elementu je proveden kvalifikovaný odhad hydraulické vodivosti. Dále jsou identifikovány hraniční stěny zájmové oblasti, na kterých jsou předepsány okrajové podmínky. Na stěnách odpovídajících geografickému povrchu jsou předepsány piezometrické výšky a porovnání vypočtené a monitorované infiltrace srážek tvoří nástroj pro kalibraci modelu. Na některých okrajových stěnách sousedících vesměs s nepropustnými vrstvami je předepsán nulový přetok a konečně na ostatních okrajových stěnách, na kterých by byla identifikace podmínky obtížná, je předepsána obecná okrajová podmínka vyjadřující vztah mezi přetokem a spádem piezometrické výšky. Vlastní model je založen na splnění Darcyho zákona a rovnice kontinuity na každém elementu ve slabém smyslu doplněném soustavou rovnic vyjadřující vzájemné bilance přetoků mezi elementy respektive interakcí objemových elementů a puklin. Diskretizací modelu odvodíme stavovou soustavu, kterou můžeme zapsat v symbolickém tvaru

$$\mathbf{A}(\alpha)\mathbf{U}(\alpha) = \mathbf{b}(\alpha),$$

kde α označuje soubor parametrů ovlivňující sestavení stavové matice i vektoru pravé strany. Do tohoto souboru náleží

- 1. geometrie geologických vrstev, bloků hornin a rozmístění tektonických poruch,
- 2. vlastnosti horninových prvků,
- 3. vlastnosti přechodu a kontaktu horninových bloků a zlomů,
- 4. rozložení okrajových podmínek různého typu,
- 5. hodnoty zadání okrajových podmínek

a podobně. Při stavbě modelu a v průběhu jeho řešení jsou výsledky zatíženy mnoha chybami. Mimo výše vyjmenované nejistoty, které vstupující do modelu, jsou výsledky zatíženy i chybami jako jsou zjednodušení fyzikálních vztahů mezi proměnnými, velikost parametru diskretizace, zaokrouhlovací chyby v průběhu výpočtu, chyby použité numerické metody. V případě modelování přírodních procesů jsou nejpodstatnějšími chybami právě nepřesnosti a nejistoty v identifikaci prostorových a geofyzikálních dat. Proto právě tímto směrem jsou zaměřeny cíle disertace. Budou vypočteny různé varianty nastavení modelu pro různé charakteristiky respektive hodnoty vstupních dat. Odchylky ve výsledcích budou hodnoceny ve smyslu norem lokálního i globálního významu. Nejprve výše uvedenou rovnici upravíme a vypočteme řešení závisející na vstupních parametrech, dostaneme

$$\mathbf{U}(\alpha) = \mathbf{A}^{-1}(\alpha)\mathbf{b}(\alpha)$$

Potom vyjádříme obecný funkcionál (například normu)

$$J[\mathbf{U}(\alpha)] = J[\mathbf{A}^{-1}(\alpha)\mathbf{b}(\alpha)],$$

Pak m-tý prvek vektoru citlivosti můžeme definovat takto:

$$C_m = \frac{\partial J}{\partial \alpha_m} \rfloor_{\alpha = \alpha^0} = \{ \frac{\partial}{\partial \alpha_m} J [\mathbf{A}^{-1}(\alpha) \mathbf{b}(\alpha)] \}_{\alpha = \alpha^0} .$$

Posouzení právě hodnot C_m pro různá nastavení α^0 je hlavním cílem této práce.

Popis hydrogeologického modelu Cajamarca

Pro řešení hydrogeologických podmínek ve vybraných lokalitách v Peru byla pro zpracování modelu vybrána lokalita Cajamarca. Základem tohoto rozhodnutí bylo relativně více geologických a strukturních dat ve srovnání s ostatními regiony v Peru, které byly pro zpracování modelu k dispozici. Je nutné na tomto místě poznamenat, že zpracování přesného modelu je natolik časově náročné, mimo jiné i na získání datových vstupů. Proto je nezbytné studovat vlivy vstupních dat na změny řešení. Vhodnou metodikou kalibrace je problém řešitelný. V našem modelu bylo nutné řadu údajů o charakteristikách podloží předpokládat a zavést do modelu jako snadno změnitelné hodnoty. Na základě výpočtu řady variant, bude možné uvedený model v budoucnu upřesňovat a kalibrovat, pokud budou k dispozici nové údaje z geologického průzkumu a hydrogeologických měření.

Cílem modelování bylo zpracování řady variantních scénářů vývoje hydrogeologické situace v hlavním aquiferu, který je dominantní pro zdroje termální vody ve sledovaných pramenech. Následně předpokládáme, že výsledky modelu budou podrobeny numerické analýze citlivosti, což povede k možnosti dalšího



Obrázek 1: Profilový řez oblastí

zpřesnění. Pak již mohou následné modelovací práce poskytnout odpovědi na řadu otázek týkajících se hydrogeologických změn v oblasti v případě rozvoje lázeňské zástavby.

Geometrie oblasti hlavního aquiferu, pro který byl model zpracován, byla zpracována pracovníky ČGS formou několika geologických řezů (tři příčné: 1, 2 a 3 a jeden podélný: 4). Obě dvě skupiny pramenů Perolitos a Tragadero se nacházejí mezi řezy 1 a 2. Dále bylo nutné omezit zájmovou oblast hraničními plochami, na kterých budou předepsány varianty okrajových podmínek. Z východu a západu jsou těmito plochami geologické profily, ze severu je oblast omezena osovou rovinou synklinály, z jihu osovou rovinou antiklinály. Z interpretace terénních dat vyplývá, že hlavní oběh vody je koncentrován zejména v této oblasti.

Pro účel přípravy matematického modelu je možné rozdělit zájmovou oblast na několik základních horninových a strukturních typů (od podloží směrem nahoru):

- 1. Nepropustné podloží (jurské souvrství Chicama, nevychází na povrch).
- 2. Hlavní aquifer hydraulicky silně propustná vrstva (kvarcity a kvarcitické pískovce Chimú), která je v řezu přítomna na celém území a v jeho jižní části vychází na povrch. Tato zóna je považována za hlavní infiltrační oblast. Z matematického hlediska se jedná o vrstvu, která je zvrásněná. V oblasti antiklinoria dochází k migraci vody po puklinovém systému a výtoku na zemský povrch. Ve střední části profilu je tato vrstva porušena násunovým zlomem, který ji s největší pravděpodobností posunul tak, že leží v přímém kontaktu s další propustnou vrstvou: pískovci Farrat.

- 3. Nepropustná vrstva, která představuje izolátor (jílovce a prachovce souvrství Santa a Carhuaz)
- 4. Propustná vrstva (pískovce Farrat), která do podzemního hydogeologického systému spojeného s termálními prameny zasahuje pouze v místě násunového zlomu, kde je v kontaktu s hlavním aquiferem kvarcity Chimú a představuje další možnou infiltrační oblast. Další nadložní horniny, které jsou znázorněné v profilu mají na hydrogeologický model malý vliv.
- 5. Významným strukturním prvkem je kromě puklinové zóny (kliváže) v ose antiklinály severojižní systém poklesových zlomů, na kterých jsou lokalizované termální prameny. Specifikou modelu je právě propojení objemových (hydrogeologické vlastnosti hornin) a plošných prvků (zlomy).

Postup při tvorbě modelu je následující. Nejprve je zájmová oblast rozdělena do několika tisíc podoblastí - elementů (v našem případě cca 16000). Na každém elementu je proveden kvalifikovaný odhad hydraulické vodivosti. Dále jsou stanoveny okrajové stěny zájmové oblasti, na kterých jsou předepsány okrajové podmínky. Na stěnách odpovídajících geografickému povrchu jsou předepsány piezometrické výšky a porovnání vypočtené a monitorované infiltrace srážek tvoří nástroj pro kalibraci modelu. Na některých okrajových stěnách sousedících vesměs s nepropustnými vrstvami je předepsán nulový přetok a konečně na ostatních okrajových stěnách, na kterých by byla identifikace podmínky obtížná, je předepsána obecná okrajová podmínka vyjadřující vztah mezi přetokem a spádem piezometrické výšky. Vlastní model je založen na splnění Darcyho zákona a rovnice kontinuity na každém elementu ve slabém smyslu doplněném soustavou rovnic vyjadřující vzájemné bilance přetoků mezi elementy respektive interakcí objemových elementů a puklin.

Popis a výsledky jednotlivých částí práce

Nyní podrobněji k jednotlivým částem práce. Ta je rozdělena do tří hlavních kapitol. V prvé kapitole je odvozen obecný hydrogeologický model pro ustálené proudění podzemní vody. Kapitola je členěna na dvě části. V prvé části jsou nejprve popsány rovnice ustáleného proudění a typy použitých okrajových podmínek. Následně je odvozeno slabé řešení ustáleného proudění založené na smíšené hybridní formulaci úlohy. Tato formulace byla zpracována koncem devadesátých let minulého století a je mnoha autory oblíbená především pro svoji přehlednost. Právě tato vlastnost je velmi důležitá pro komplikované hydrogeologické systémy. Pro diskretizaci byly použity lineární vektorové funkce pro aproximaci filtrační rychlosti a po částech konstantní funkce pro aproximaci tlakové výšky v jednotlivých elementech a na mezielementových stěnách. Do aplikací byla tato

formulace využívána od počátku devadesátých let. Pro reálná řešení potřebuje dostatečně výkonnou výpočetní techniku, neboť dimenze odvozených rovnic jsou až šestinásobek počtu elementů. Ve druhé části této kapitoly je uvedeno možné propojení prvků různé dimenze, které bylo zpracováno v letech 2003-04 a na formulaci se podíleli Maryška, Severýn a Vohralík. Vzhledem ke komplikované geologické struktuře v oblasti, ve které bude zpracován studie numerické citlivosti, byl pro diskretizaci použit kombinovný model spojující 3D prvky a 2D prvky, které znázorňují zlomy. Popsaný model byl vyvíjen v letech 2004-2006. Na jeho formulaci se podíleli Maryška, Severýn a Vohralík. Implementaci kódu vypracoval Severýn a dále doplnila a testovala na modelových úlohách Královcová.

Druhá kapitola je věnována popisu lokality Cajamarca. Jsou popsány geografické charakteristiky, geologické vlastnosti jednotlivých vrstev a hydrogeologii lokality. Numerická citlivost kombinovaného modelu byla studována právě v oblasti, pro kterou je k dispozici velmi málo dat. Ta jsou dána vesměs povrchovým sběrem hornin a zkušenostmi geologů, kteří pro model připravili několik profilových řezů. Dále byly k dispozici srážkové poměry v oblasti ze sedmdesátých let minulého století a měření vydatnosti horkých pramenů. Posouzení citlivosti modelů má právě prokázat míru jeho stability a zvýšit tedy i věrohodnost výsledků modelů, které čerpáním povýší vydatnost čerpání horkých podzemních vod. Na závěr kapitoly je zpracována nulová varianta hydrologické situace lokality, ke které budou ostatní varianty posuzovány. Na přípravě výpočtu nulové varianty se účastnila Královcová. Výpočetní sítě připravovala Capeková a upravovala Královcová.

Hlavní výsledky práce jsou soustředěny ve třetí kapitole. Zde jsou postupně variovány vlastnosti hydraulické vodivosti hlavního aquiferu, měněny Dirichletovy okrajové podmínky na infiltrační části terénu. Konečně jsou i měněny Newtonovy okrajové podmínky na horní části aquiferu a na západní a východní části lokality. Odchylky stavových proměnných jsou zpracovány jako pole změn a posouzeny v takovéto formě. Dále jsou odchylky zpracovány i ve funkcionální formě a graficky vyhodnoceny. Hodnocení citlivosti stavových veličin na změny vlastností horninového prostředí a změny okrajových podmínek je komentováno jednak u každé úlohy a shrnuto v závěru práce. Tato část práce je významně dokumentována tabulkami výsledků, grafy závislostí a řadou obrázků.

Část I Hydrogeologický model

1 Matematicko - fyzikální model úlohy ustáleného proudění

V této části nejprve shrneme matematický popis sledovaných procesů. Proudění podzemní vody je popsáno Darcyho zákonem, který zapíšeme ve tvaru:

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

a rovnicí kontinuity, která pro nasycené prostředí má tvar

 $\nabla\cdot\mathbf{u}=0$

zde **u** označuje filtrační rychlost, p tlakovou výšku, π označuje dynamickou složku tlaku, ρ je hustota vody a g gravitační konstanta. **K** označuje tenzor hydraulické vodivosti, o kterém předpokládáme, že má diagonální tvar a tedy nenulové souřadnice jsou pouze K_{xx}, K_{yy} a K_{zz} .

Na hraničních plochách oblasti jsou předepsány okrajové podmínky. Na částech hranice zadaných povrchem terénu jsou zadány Dirichletovy okrajové podmínky ve tvaru

 $p = p_D$

kde p_D označuje tlakovou výšku podzemní vody. Na částech hranice Γ_N sousedících vesměs s vrstvami velmi malou hydraulickou vodivostí, jsou zadány Neumannovy okrajové podmínky ve tvaru

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

kde **n** označuje jednotkový vektor vnější normály a skalární funkce u_N označuje tok vody hranicí. Identifikace tohoto parametru bude předmětem variantních scénářů. Konečně na zbývajících částech hranice Γ_T , na kterých je identifikace okrajové podmínky obtížná, použijeme Newtonovy okrajové podmínky vyjadřující vztah mezi tokem a spádem tlakové výšky. Tento vztah můžeme zapsat ve tvaru:

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

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

1.1 Odvození slabého řešení

Oblast řešení označíme Ω a rozložíme do mnoha podoblastí - elementů. Systém těchto podoblastí označíme E_h . Symbolem Γ označíme strukturu stěn oddělujících jednotlivé podoblasti kromě té části, na které je zadána Dirichletova okrajová podmínka. Tato část je pak označena Γ_D . Dále budeme požadovat, aby stavové funkce vyjadřující tlakové pole i pole filtračních rychlostí splňovaly ve slabém smyslu Darcyho zákon i rovnici kontinuity na každé takové podoblasti. Na struktuře ploch oddělujících podoblasti požadujeme splnění podmínek transmise - tedy podmínek vyrovnané bilance vnějších toků vystupující z přiléhajících elementů. Tenzor hydraulického odporu horninového prostředí označíme symbolem **R** (tedy $\mathbf{R} = \mathbf{K}^{-1}$). Řešením úlohy podzemního proudění nazveme trojici funkcí \mathbf{u}, p, λ z prostoru $\mathbf{W}(\Omega) = \mathbf{H}(div; \Omega) \times L_2(\Omega) \times H^{1/2}(\Gamma)$, kde \mathbf{u} vyjadřuje vektorovou funkci pole filtračních rychlostí, p označuje skalární funkci tlakové výšky a λ označuje stopu tlakové výšky na stěnách rozkladu Γ oblasti Ω , které splňují následující rovnice

$$\sum_{e \in E_h} \int_e \mathbf{R}^e \mathbf{u}^e \cdot \mathbf{v}^e dV - \sum_{e \in E_h} \int_e (p^e + z^e) \, \nabla \cdot \mathbf{v}^e dV + \sum_{e \in E_h} \int_{\partial e \cap \Gamma} (p^{\partial e} + z^{\partial e}) \, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e dS = -\sum_{e \in E_h} \int_{\partial e \cap \Gamma_D} (p^{\partial e}_D + z^{\partial e}_D) \, \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{n}^e dS$$

$$\sum_{e \in E_h} \int_e \nabla \cdot \mathbf{u}^e \,\varphi^e dV = 0$$
$$\sum_{e \in E_h} \int_{\partial e \cap \Gamma_E} \mathbf{u}^e \cdot \mathbf{n}^e \,\mu^{\partial e} dS = 0 \tag{1.1}$$
$$\sum_{e \in E_h} \int_{\partial e \cap \Gamma_N} \mathbf{u}^e \cdot \mathbf{n}^e \,\mu^{\partial e} dS = \sum_{e \in E_h} \int_{\partial e \cap \Gamma_N} u_N^{\partial e} \mu^{\partial e} dS$$
$$\sum_{e \in E_h} \int_{\partial e \cap \Gamma_T} \mathbf{u}^e \cdot \mathbf{n}^e \,\mu^{\partial e} dS + \sum_{e \in E_h} \int_{\partial e \cap \Gamma_T} \sigma^{\partial e} p^{\partial e} \mu^{\partial e} dS = \sum_{e \in E_h} \int_{\partial e \cap \Gamma_T} \sigma^{\partial e} p_T^{\partial e} \mu^{\partial e} dS$$

pro libovolné trojice testovací funkcí \mathbf{v}, φ, μ vybrané též z prostoru $\mathbf{W}(\Omega) = \mathbf{H}(div; \Omega) \times L_2(\Omega) \times H^{1/2}(\Gamma)$. V integrální rovnicích označují horní indexy restrikci funkcí na uvedenou podoblast respektive její hranici.

Abychom zjednodušili zápisy rovnic pro další úpravy označíme integrály pomocí závorek. Pro skalární součin v prostoru $L_2(\Omega)$ použijeme kulaté závorky a na hraniční formu (tj. povrchové integrály) použijeme ostré závorky. Potom můžeme výše uvedené rovnice zapsat ve zjednodušeném tvaru (index u příslušných závorek označuje oblast integrace a horní indexy u funkcí označují restrikci této funkce na danou podoblast e respektive její hranici ∂e).

$$\sum_{e \in E_{h}} (\mathbf{R}^{e} \mathbf{u}^{e}, \mathbf{v}^{e})_{e} - \sum_{e \in E_{h}} ((p^{e} + z^{e}), \nabla \cdot \mathbf{v}^{e})_{e} + \sum_{e \in E_{h}} \langle (\lambda^{\partial e} + z^{\partial e}), \mathbf{v}^{e} \cdot \mathbf{n}^{e} \rangle_{\partial e \cap \Gamma} = -\sum_{e \in E_{h}} \langle (p^{\partial e}_{D} + z^{\partial e}), \mathbf{v}^{e} \cdot \mathbf{n}^{e} \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{D}}$$

$$\sum_{e \in E_{h}} (\nabla \cdot \mathbf{u}^{e}, \varphi^{e})_{e} = 0$$

$$\sum_{e \in E_{h}} \langle \mathbf{u}^{e} \cdot \mathbf{n}^{e}, \mu^{\partial e} \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{E}} = 0 \qquad (1.2)$$

$$\sum_{e \in E_{h}} \langle \mathbf{u}^{e} \cdot \mathbf{n}^{e}, \mu^{\partial e} \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{T}} + \sum_{e \in E_{h}} \langle \sigma \lambda^{\partial e}, \mu^{\partial e} \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{T}} = \sum_{e \in E_{h}} \langle \sigma p^{\partial e}_{T}, \mu^{\partial e} \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{T}}$$

Tuto soustavu integrodiferenciálních rovnic budeme nyní diskretizovat a odvodíme soustavu lineárních rovnic.

1.2 Diskretizace modelu užitím MH FEM

Podoblasti rozdělující zájmový prostor budeme v dalším textu nazývat elementy. Parametr diskretizace označíme h. Původní prostor vektorových funkcí reprezentující toky označený výše jako $\mathbf{H}(div; \Omega)$ budeme dále aproximovat prostorem $\mathbf{RT}_{-1}^{0}(E_{h})$, který je definován jako lineární obal konečné baze tvořené po částech lineárními funkcemi (lineárními na každém elementu e). Na zvolené podoblasti e bude mít i-tá funkce následující tvar

$$\mathbf{v}_{i}^{e} = k_{i}^{e} \begin{pmatrix} x - \alpha_{1i}^{e} \\ y - \alpha_{2i}^{e} \\ z - \alpha_{3i}^{e} \end{pmatrix}$$
(1.3)

Na 3D podoblasti - simplexovém elementu - dostaneme čtyři takové funkce, na 2D podoblasti tvořené trojúhelníkem dostaneme tři funkce a na 1D podoblasti - liniovém prvku dostaneme dvě takové funkce. Tyto funkce budou splňovat podmínku jednotkového toku každou částí hranice ∂e , která odděluje dva sousední elementy. Tuto podmínku vyjádřit následovně:

$$\int_{f_j} \mathbf{v}_i^e \cdot \mathbf{n}_j^e \, dS = \delta_{ij} \tag{1.4}$$

Zde f_j označuje *j*-tou stěnu elementu *e* a \mathbf{n}_j je jeho jednotková vnější normála, δ_{ij} je Croneckerův symbol. Množinu indexů vektorových funkcí označíme *I* a její mohutnost označíme |I|.

Prostory $L_2(\Omega)$ respektive $H^{1/2}(\Omega)$ budeme aproximovat pomocí prostorů $M^0(E_h)$ respektive $M^0(\Gamma_h)$ po částech konstantních funkcí, tedy konstantních funkcí na každém elementu $e \in E_h$ respektive na každé stěně oddělující dva elementy $f \in \Gamma_h$.

Bázové funkce těchto prostorů můžeme popsat následovně:

$$\varphi_i^e(x) = \begin{cases} 1 & x \in e \land i = e \\ 0 & x \notin e \end{cases}$$
(1.5)

$$\mu_j^f(x) = \begin{cases} 1 & x \in f \land j = f \\ 0 & x \notin f \end{cases}$$
(1.6)

Nyní zavedeme následující indexové označení. Indexovou množinu všech elementů označíme J a její mohutnost označíme |J| a konečně indexovou množinu všech mezielementových i vnějších stěn oznaíme K a její mohutnost označíme |K|. Pro vnitřní mezielementové stěny budeme užívat množinu indexů označených symbolem K_E . A podobně pro vnější stěny, na kterých jsou zadány postupně Dirichletovy, Neumannovy respektive Newtonovy okrajové podmínky označíme symboly K_D, K_N, K_T . Jejich mohutnosti označíme analogicky $|K_D|, |K_N|$ a $|K_T|$. Tedy tímto způsobem máme identifikovány všechny funkce, které vystupují v definici slabého řešení a náležitosti jednotlivých funkcí jednotlivým elementům již nemusíme vyznačovat. Budeme to činit jen v případech, kdy chceme tuto skutečnost zvýraznit.

Přibližné řešení úlohy proudění budeme hledat ve formě lineární kombinace bázových funkcí, tedy ve tvaru:

$$\mathbf{u}_{h}(\mathbf{x}) = \sum_{i \in I} U_{i} \mathbf{v}_{i}(\mathbf{x})$$

$$p_{h}(\mathbf{x}) = \sum_{j \in J} P_{j} \varphi_{j}(\mathbf{x})$$

$$\lambda_{h}(\mathbf{x}) = \sum_{k \in K} \Lambda_{k} \mu_{k}(\mathbf{x})$$
(1.7)

Dosazením uvedených vztahů (1.7) do systému integrálních rovnic (1.3), odvodíme pro bázové testovací funkce soustavu lineárních algebraických rovnic.

Označíme-li $A_{ij}^e = (\mathbf{R}^e \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)_e$, dostaneme blokovou matici \mathbf{A}^e , jejíž prvky jsou nenulové pouze tehdy jsou-li zvolené indexy i, j indexy vektorových funkcí, jejichž definičním oborem je element e.

Dále označíme $\mathbf{B}_{ij}^e = -(\varphi_i, \nabla \cdot \mathbf{v}_j)_e$ dostaneme blokovou matici \mathbf{B}^e , jejíž prvky jsou opět nenulové jedině tehdy, když funkce φ_i a \mathbf{v}_j mají definiční obor element *e*. V tomto případě bude $\mathbf{B}_{ij} = -1$. To plyne z definice funkce φ_i viz (1.5) a z vlastnosti vektorové funkce vj viz (1.4). V ostatních případech bude souřadnice rovna nule.

Konečně označíme $C_{ij}^{\partial e} = \langle \mu_i, \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e}$ dostaneme blokovou matici $\mathbf{C}^{\partial e}$, jejíž prvky jsou opět nenulové jedině tehdy, když funkce μ_i má definiční obor na stěně f elementu e a \mathbf{v}_j má definiční obor na elementu e a realizuje jednotkový přetok stěnou f. V tomto případě bude $\mathbf{C}_{ij} = 1$. Plyne to z definice funkce μ_i viz (1.6) a z vlastnosti vektorové funkce \mathbf{v}_j viz (1.4). V ostatních případech bude souřadnice \mathbf{C}_{ij} rovna nule.

Obdobně vypočteme i subvektory pravé strany, které závisí na zadaných okrajových podmínkách.

V uvedené interpretaci lze soustavu (1.2) zapsat ve tvaru lineárních algebraických rovnic:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ \mathbf{B}^{\mathrm{T}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}^{\mathrm{T}} & \mathbf{0} & \mathbf{T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{P} \\ \mathbf{\Lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{D} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{q}_{T} \end{pmatrix}$$
(1.8)

Nyní probereme výpočet jednotlivých souřadnic ještě podrobněji

1.3 Algoritmus výpočtu diskrétní soustavy

Nejprve vypočteme prvky bloku \mathbf{A}^e . Ten se sestává z diagonálních bloků, jejichž rozměr je dán dimenzí prostoru vektorových funkcí definovaných na elementu. Tato dimenze je dána počtem stěn 3D prvku, počtem hran 2D prvku, u liniových prvků je rozměr tohoto bloku vždy 2×2. U simplexových prvků je rozměr bloku \mathbf{A}^e pro 3D prvky (čtyřstěny) 4×4 a pro 2D prvky - trojúhelníky 3×3. Jednotlivé souřadnice jsou dány vztahem:

$$\left[\mathbf{A}^{e}\right]_{ij} = \int_{e} \left[\mathbf{v}_{i}^{e}\right]^{T} \mathbf{R}^{e} \left[\mathbf{v}_{j}^{e}\right] dV =$$

$$= k_{i}^{e} k_{j}^{e} \int_{e} \left(x - \alpha_{1i}^{e} \quad y - \alpha_{2i}^{e} \quad z - \alpha_{3i}^{e}\right) \mathbf{R}^{e} \begin{pmatrix} x - \alpha_{1j}^{e} \\ y - \alpha_{2j}^{e} \\ z - \alpha_{3j}^{e} \end{pmatrix} dV$$

$$(1.9)$$

Blok **A** je blokově diagonální matice, jejíž diagonální bloky jsou tvořeny lokálními bloky \mathbf{A}^{e_j} ; $j \in J$. Tedy strukturu bloku A lze znázornit následujícím schématem

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{e_1} & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & \mathbf{A}^{e_{|J|}} \end{pmatrix}$$
(1.10)

Snadno vypočteme a sestavíme blok B, jehož rozměr je $|I| \times |J|$. Tento blok se sestává z diagonálních subbloků o rozměrech 4×1 pro čtyřstěn, 3×1 pro trojúhelník a 2×1 pro úsečku (liniový prvek). Na základě definice jednotlivých souřadnic subbloku a vlastností vektorových funkcí dané vztahem (1.4) odvodíme:

$$-\int_{e} \varphi^{e} \nabla \cdot \mathbf{v}_{j}^{e} \, dV = -\int_{e} \nabla \cdot \mathbf{v}_{j}^{e} \, dV = -1 \tag{1.11}$$

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

pro úsečku.

Strukturu bloku B lze znázornit schématem:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{e_1} & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & \mathbf{B}^{e_{|J|}} \end{pmatrix}$$
(1.12)

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

Rozdělíme indexovou množinu K do dvou podmnožin $K = K^0 \cup K^\partial$ vnitřních a okrajových stěn, na kterých není zadána Dirichletova okrajová podmínka. Potom můžeme matici C znázornit schématem:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}^0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}^\partial \end{pmatrix} \tag{1.13}$$

Konečně blok T má rozměr $|K|\times |K|$ a je diagonální. Užijeme-li zavedenou symboliku, můžeme blok T znázornit

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T}^{\partial} \end{pmatrix} \tag{1.14}$$

Na diagonále vnitřních stěn je nula, stejně tak jako na pozicích okrajových stěn, na kterých je zadána Neumannova okrajová podmínka. Na diagonálních pozicích, které náleží okrajovým stěnám s Newtonovou okrajovou podmínkou, jsou odpovídající přechodové koeficienty se záporným znamením. Tedy na k-té "Newtonově" stěně je číslo $-\sigma_k S_k$, kde S_k označuje plochu k-té stěny.

Na pravé straně soustavy (1.8) jsou dva subvektory q_D, q_T . Subvektor q_D zadává do soustavy vliv Dirichletových okrajových podmínek. Na j-té pozici tohoto subvektoru je číslo vypočtené ze vztahu

$$[q_D]_j = -Z_T^j - P_D^j \tag{1.15}$$

Zde připomínáme, že ve vztahu (1.15) symbol Z_T^j vyjadřuje těžiště j-té stěny a symbol P_D^j je hodnota Dirichletovy okrajové podmínky na j-té stěně.

Subvektor q_T zadává do soustavy vliv Neumanovy respektive Newtonovy okrajových podmínek. Na k-té stěně zadána Neumannova okrajová podmínka bude na k-té pozici tohoto subvektoru číslo

$$\left[q_T\right]_k = U_N^k \tag{1.16}$$

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

$$\left[q_T\right]_k = -\sigma^k P_N^k S_k \tag{1.17}$$

kde σ_k zadává ko
eficient přechodu na této stěně, P_N^k zadává hodnotu tlakové výšky na této stěně
a S_k označuje plochu k-té stěny.

2 Kombinovaný model - propojení prvků různých dimenzí

V této kapitole se budeme věnovat stavbě modelů pro řešení hydrogeologické situace v reálných horninových formacích. Reálné horninové útvary mohou být a obvykle bývají velmi heterogenní svými geofyzikálními a geochemickými vlastnostmi a tedy i hydrogeologickými vlastnostmi. Podzemní voda proudí nejen rozsáhlými bloky sedimentů, ale i bloky porušených granitů, rul a dalších hornin.

Všechny typy hornin jsou obvykle dále porušené tektonickou činností a mohou tedy obsahovat množství puklinových zón, které významně mění hydrogeologickou situaci ve srovnání s představou proudění v homogenizovaných horninových blocích. Tedy reálná situace vyžaduje aplikaci prvků s různými hydrogeologickými vlastnosti. Proto tato kapitola popisuje stavbu modelů, které využívají jak 3D bloky horniny vzájemně oddělené jednotlivými hydraulicky významnými puklinami nebo dokonce 2D prvky představující vlastnosti úzkých puklinových zón.

Je třeba připomenout, že významnou heterogenitu horninového prostředí lze částečně řešit i použitím velmi heterogenní sítě obsahující pouze různě veliké 3D prvky s výraznými změnami hydraulické vodivosti. Takovéto řešení lze vnímat jako náhradní, neboť generuje celou řadu problémů spojených s regularitou sítě, špatnou podmíněností výsledných soustav a tím i s omezeným rozsahem (ve smyslu počtu prvků) řešených úloh.

Problém stavby modelu používajícího prvky různé dimenze (dále nazývané kombinované modely proudění) budeme řešit v několika verzích. Pokud je geometrie heterogenního horninového prostředí "jednoduchá", doporučujeme použít kombinovaný model s kompatibilní konfigurací. Tedy model, ve kterém jsou 2D prvky současně dělícími stěnami 3D prvků. V komplikovaném geologickém prostředí může být příprava kompatibilní sítě problematická, proto navazující kapitoly se zabývají i stavbou nekompatibilní verze modelu, kdy v zájmovém horninovém prostředí působí do jisté míry nezávisle 3 systémy přenášející podzemní vodu - jednak porézní 3D bloky, dále 2D puklinovou sítí tektonických poruch a konečně i liniovou sítí 1D prvků (mohou reprezentovat síť tunelů apod.). Tyto tři sítě mohou působit jak nezávisle, tak mohou být propojeny vazbami definujícími podmínky přechodu podzemní vody mezi uvedenými druhy systémů. Tyto vazby jsou současně i parametry kalibrace kombinovaného modelu. Oba uvedené přístupy budeme využívat pro stavbu jak ustálených tak i neustálených režimů proudění.

2.1 Kombinovaný model - ustálené proudění

V předcházející kapitole jsme odvodili model pro ustálené proudění založený na smíšené hybridní formulaci úlohy. Přitom celé odvození je platné pro simplexové prvky všech dimenzí. Tedy formálně můžeme stavovou matici pro liniový systém zapsat ve tvaru

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{1} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{A}_{J} \end{pmatrix}_{1} & \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{1} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{B}_{J} \end{pmatrix}_{1} & \mathbf{C}_{1} \\ \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{1}^{T} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{B}_{J}^{T} \end{pmatrix}_{1} & & & & \\ & & & & & \\ \mathbf{C}_{1}^{T} & & & \mathbf{0} & & \mathbf{0} \\ & & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & &$$

Pro tento případ jsou blokové matice \mathbf{A}_i reprezentovány bloky 2 × 2, neboť na každém prvku jsou definovány dvě vektorové funkce reprezentující jednotkové "liniové" vnější toky. V případě napojení takového to systému na systém vyšší dimenze bude nutné dát těmto veličinám odpovídající fyzikální rozměr. Bloky \mathbf{B}_j jsou reprezentovány vektorem 2 × 1 , jehož souřadnice jsou rovny -1. Konečně submatice \mathbf{C}_1 je tvořena 2 $|I_1|$ řádky a $|K_1|$ sloupci. V každém sloupci, který náleží dělícímu "vnitřnímu" uzlu jsou dvě nebo více jedniček. Počet jedniček je dán počtem elementů, který daný uzel odděluje. Jedničky jsou pak na těch řádcích, které odpovídají oddělovaným elementům a lokálnímu číslování daného uzlu v daném koincidujícím elementu. U "vnějších" uzlů je ve sloupci právě jedna jednička na místě příslušného koincidujícího elementu a pozici odpovídající lokálnímu číslování tohoto uzlu v elementu. "Vnější" uzly, ve kterých je zadána Dirichletova okrajová podmínka nemají v bloku \mathbf{C}_1 svůj sloupec, neboť jsou součástí pravé strany, tedy vektoru \mathbf{q}_{D1} . Podobně můžeme stavovou matici pro puklinový systém zapsat ve tvaru

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{1} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{A}_{J} \end{pmatrix}_{2} & \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{1} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{B}_{J} \end{pmatrix}_{2} & \mathbf{C}_{2} \\ \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{1}^{\mathbf{T}} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{B}_{J}^{\mathbf{T}} \end{pmatrix}_{2} & & & & \\ & & & & & \\ \mathbf{C}_{2}^{\mathbf{T}} & & & \mathbf{0} & & \mathbf{0} \\ & & & & & \\ \mathbf{C}_{2}^{\mathbf{T}} & & & \mathbf{0} & & \mathbf{T}_{2} \end{pmatrix}$$
 (2.2)

V tomto případě jsou blokové matice \mathbf{A}_i reprezentovány bloky 3×3 , neboť na každém prvku jsou definovány tři vektorové funkce reprezentující jednotkové "plošné" vnější toky. I v případě napojení puklinového systému na systém 3D prvků bude nutné dát těmto veličinám odpovídající fyzikální rozměr. Bloky \mathbf{B}_j jsou reprezentovány vektorem 3×1 , jehož souřadnice jsou rovny -1. Konečně submatice \mathbf{C}_2 je tvořena $3|I_2|$ řádky a $|K_2|$ sloupci. V každém sloupci, který

náleží dělící "vnitřní" hraně jsou dvě nebo více jedniček. Počet jedniček je dán počtem elementů, který daná hrana odděluje. Jedničky jsou pak na těch řádcích, které odpovídají oddělovaným elementům a lokálnímu číslování dané hrany v daném koincidujícím elementu. U "vnějších" hran je ve sloupci právě jedna jednička na místě příslušného koincidujícího elementu a pozici odpovídající lokálnímu číslování této hrany v elementu. "Vnější" hrany, ve kterých je zadána Dirichletova okrajová podmínka nemají v bloku C_2 svůj sloupec, neboť jsou součástí pravé strany, tedy vektoru q_{D2} .

Konečně můžeme i stavovou matici pro objemový 3D systém zapsat ve formálním tvaru

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{1} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{A}_{J} \end{pmatrix}_{\mathbf{3}} & \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{1} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{B}_{J} \end{pmatrix}_{\mathbf{3}} & \mathbf{C}_{\mathbf{3}} \\ \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{1}^{\mathbf{T}} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{B}_{J}^{\mathbf{T}} \end{pmatrix}_{\mathbf{3}} & & & & \\ & & & & & \\ \mathbf{C}_{\mathbf{3}}^{\mathbf{T}} & & & \mathbf{0} & & \mathbf{T}_{\mathbf{3}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{\mathbf{3}} & \mathbf{B}_{\mathbf{3}} & \mathbf{C}_{\mathbf{3}} \\ \mathbf{B}_{\mathbf{3}}^{\mathbf{T}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_{\mathbf{3}}^{\mathbf{T}} & \mathbf{0} & \mathbf{T}_{\mathbf{3}} \end{pmatrix}$$
(2.3)

V tomto případě jsou blokové matice \mathbf{A}_i pro simplexové prvky reprezentovány bloky 4 × 4, neboť na každém prvku jsou definovány čtyři vektorové funkce reprezentující jednotkové "objemové" vnější toky. Pokud na tento systém budeme napojovat systémy nižší dimenze, musí být puklinové a liniové toky rozměrově upraveny tak, aby odpovídaly tokům objemovým. Bloky \mathbf{B}_j jsou reprezentovány vektorem 4 × 1, jehož souřadnice jsou rovny −1. Konečně submatice \mathbf{C}_3 je tvořena 4 $|I_3|$ řádky a $|K_3|$ sloupci. V každém sloupci, který náleží dělící "vnitřní" stěně jsou právě dvě jedničky, protože v tomto případě každá stěna odděluje právě dva elementy. Jedničky jsou na těch řádcích, které odpovídají oddělovaným elementům a lokálnímu číslování dané stěny v daném koincidujícím elementu. U "vnějších" stěn je ve sloupci právě jedna jednička na místě příslušného koincidujícího elementu a pozici odpovídající lokálnímu číslování této stěny v elementu. "Vnější" stěny, na kterých je zadána Dirichletova okrajová podmínka nemají v bloku \mathbf{C}_3 svůj sloupec, neboť jsou součástí pravé strany, tedy vektoru \mathbf{q}_{D3} .

Nyní popíšeme způsob napojení 3D a 2D prvků. Situace je znázorněna na obrázku 2. Nechť mezi dva objemové prvky je vložena stěna, která je součástí puklinové sítě a může tedy odvádět část podzemní vody do propojeného systému puklin nebo naopak přivádět vodu do objemových prvků.

To jakým způsobem budou tyto prvky mezi sebou komunikovat závisí na tlakové výšce, která je v těžištích navazujících stěn. Dále je důležité si uvědomit, že pokud na sebe dva objemové prvky přímo navazovaly, tvořila společná



Obrázek 2: Spojení 3D prvků přez 2D prvek

stěna oddělující stěnu, na které byl vypočtena jedna tlaková výška. Pokud mezi stěnami je umístěn puklinový prvek, potom jsou původní stěny okrajové a tedy samostatné a mohou na nich být rozdílné tlakové výšky. Nechť tedy na stěnách objemových prvků je tlaková výška dána hodnotami λ_1 respektive λ_2 a mezi nimi leží puklinový prvek, jehož tlaková výška v těžišti je dána hodnotou p, nechť dále mezi prvním objemovým prvkem a prvkem puklinovým je přechodový stav charakterizován hodnotou σ_1 a mezi druhým objemovým prvkem a prvkem puklinovým je přechodový stav charakterizován hodnotou σ_2 . Potom okrajové podmínky na sledovaném rozhraní můžeme vyjádřit ve tvaru:

$$\mathbf{u}_{1} \cdot \mathbf{n}_{1} = \sigma_{1} \left(\lambda_{1} - p \right) ; \quad \mathbf{u}_{2} \cdot \mathbf{n}_{2} = \sigma_{2} \left(\lambda_{2} - p \right)$$
(2.4)

Tyto podmínky vytvoří modifikace v původně odvozených soustavách pro síť objemových prvků a puklinovou síť, které jsme zapsali do jedné kombinované soustavy. Přitom nejprve musíme modifikovat původní soustavu pro puklinovou síť tím, že jednotlivé blokové lokální matice příslušné jednotlivým elementům násobíme rozevřením. Tedy parametrem d^e . Přitom dbáme, aby byla zřejmá korelace mezi parametrem rozevření a hydraulickou vodivostí každého elementu. Tedy $d_1^e \approx ||K_2^e||$. Tato úprava je formálně znázorněna horní vlnovkou.

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{3} & \mathbf{B}_{3} & \mathbf{C}_{3}^{\#} \\ \mathbf{B}_{3}^{\mathrm{T}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_{3}^{\#\mathrm{T}} & \mathbf{0} & \mathbf{T}_{3}^{\#} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{t}_{23} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{t}_{32} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{2}^{\sim} & \mathbf{B}_{2}^{\sim} & \mathbf{C}_{2}^{\sim} \\ \mathbf{B}_{2}^{\sim\mathrm{T}} & \mathbf{d}_{2}^{\#} & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_{2}^{\sim\mathrm{T}} & \mathbf{0} & \mathbf{T}_{2}^{\sim} \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$
(2.5)

Soustava je navíc doplněna o propojující bloky \mathbf{t}_{23} respektive \mathbf{t}_{32} , přičemž snadno z odvození uvidíme, že bude platit symetrie celé soustavy, specielně, že $\mathbf{t}_{23} = \mathbf{t}_{32}^T$. Dále jsou upraveny bloky \mathbf{C}_3 a \mathbf{T}_3 . Všechny naznačené úpravy jsou symetrické a nyní tyto úpravy popíšeme. V původní soustavě odpovídající 3D síti jsou sousední prvky odděleny jednou stěnou. Pokud se mezi tyto prvky zařadí puklinový prvek, potom se z původních vnitřních objemových prvků stavají prvky okrajové ve vztahu k 3D síti a komunikují pouze s prvkem puklinovým. Tedy předpokládejme, že k této situaci doško na k-té stěně oddělující i_1 a i_2 objemový prvek. Potom se původní k-tý sloupec bloku \mathbf{C}_3 rozdělí na dva sloupce k_1 a k_2 , které budou mít v uvedeném bloku již pouze jednu jedničku (náležící příslušné pozici stěny i_1 -ního respektive i_2 -hého prvku. A pochopitelně i k-tý řádek matice \mathbf{C}_3^T se rozdělí na dva řádky, které mají v příslušných pozicích bloku \mathbf{C}_3 a \mathbf{C}_3^T dojde současně i k rozšíření bloku \mathbf{T}_3 , který měl na původní k-té souřadnici na diagonále nulu. Nyní na čtyřech vzniklých pozicích budou následující hodnoty

$$[\mathbf{T}_{\mathbf{3}}]_{k_1k_1} = -\sigma_1; \ [\mathbf{T}_{\mathbf{3}}]_{k_2k_2} = -\sigma_2; \ [\mathbf{T}_{\mathbf{3}}]_{k_1k_2} = 0; \ [\mathbf{T}_{\mathbf{3}}]_{k_2k_1} = 0,$$
(2.6)

což snadno nahlédneme úpravou vztahu (2.4). Navíc do levého sousedícího bloku, který byl původně nulový, přibude nenulový příspěvek do bloku $\mathbf{t_{23}}$. Má-li puklinový prvek index *j* pak v bloku $\mathbf{t_{23}}$ budou následující nenulové souřadnice:

$$[\mathbf{t_{23}}]_{k_1j} = \sigma_1; \ [\mathbf{t_{23}}]_{k_2j} = \sigma_2.$$
 (2.7)

Touto úpravou jsme do modelu zahrnuly skutečnost, že ze 3D bloků může být část vody odváděna vloženou puklinou. Nyní musíme tuto skutečnost zahrnout i do druhého to je puklinového systému. Uvedené vnější přetoky z objemového systému tvoří v j-tém puklinovém elementu zdroj. Tento zdroj se promítne do střední blokové části puklinového systému následujícím způsobem:

Na j-tý řádek bloku $\mathbf{t_{32}}$ do pozic k_1 a k_2 sloupce zapíšeme hodnoty σ_1 respektive σ_2 . Tedy

$$[\mathbf{t_{32}}]_{jk_1} = \sigma_1; \ [\mathbf{t_{32}}]_{jk_2} = \sigma_2.$$
 (2.8)

A tedy $\mathbf{t_{23}} = \mathbf{t_{32}^T}$. Dále na *j*-tou diagonální pozici bloku $\mathbf{d_2^{\#}}$ zapíšeme hodnotu $-\sigma_1 - \sigma_2$.

$$\left[\mathbf{d}_{\mathbf{2}}^{\#}\right]_{jj} = -\sigma_1 - \sigma_2. \tag{2.9}$$

Tím je propojení objemových a puklinových prvků dokončeno.

Nyní popíšeme způsob napojení 2D a 1D prvků. Situace je znázorněna na obrázku 3. Nechť mezi dva puklinové prvky je vložena hrana, která je součástí liniové sítě a může tedy odvádět část podzemní vody do propojeného systému liniových prvků nebo naopak přivádět vodu do puklinového systému.



Obrázek 3: Spojení 2D prvků přez 1D prvek

To jakým způsobem budou tyto prvky mezi sebou komunikovat závisí shodně jako v předchozím případě na tlakové výšce, která je v těžištích navazujících hran. Je-li mezi hranami umístěn liniový prvek, potom jsou původní hrany okrajové a mohou na nich být rozdílné tlakové výšky. Nechť tedy na hranách puklinových prvků je tlaková výška dána hodnotami $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m$ a mezi nimi leží liniový prvek, jehož tlaková výška v těžišti je dána hodnotou p, nechť dále mezi prvním puklinovým prvkem a prvkem liniovým je přechodový stav charakterizován hodnotou σ_1 , mezi druhým puklinovým prvkem a prvkem liniovým je přechodový stav charakterizován hodnotou σ_2 a tak dále. Tedy mezi m-tým puklinovým prvkem a prvkem liniovým je přechodový stav charakterizován hodnotou σ_m . Potom okrajové podmínky na sledovaném rozhraní můžeme vyjádřit ve tvaru :

$$\mathbf{u_1} \cdot \mathbf{n_1} = \sigma_1 \left(\lambda_1 - p \right); \ \mathbf{u_2} \cdot \mathbf{n_2} = \sigma_2 \left(\lambda_2 - p \right); \ \dots; \mathbf{u}_m \cdot \mathbf{n}_m = \sigma_m \left(\lambda_m - p \right). \ (2.10)$$

Tyto podmínky vytvoří modifikace v původně odvozených soustavách pro síť puklinových a liniových prvků, které jsme zapsali do jedné kombinované soustavy. Nyní musíme modifikovat původní soustavu pro puklinovou i liniovou síť. Jednotlivé blokové lokální matice příslušné jednotlivým elementům puklinové sítě násobíme rozevřením. Tedy parametrem d_1^e . Podobně upravíme i soustavu odvozenou ze systému liniových prvků. Jednotlivé blokové lokální matice příslušné jednotlivé matice příslušné jednotlivým elementům liniové sítě násobíme plochou průřezu. Tedy parametrem d_2^e . Opět dbáme na korelaci mezi parametry rozevření a průřezu a příslušnou hodnotou hydraulické vodivosti, tedy $d_1^e \approx ||\mathbf{K}_2^e||$; $d_2^e \approx ||\mathbf{K}_2^e||$. Tato

úprava je formálně znázorněna horní vlnovkou.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{2}^{\sim} & \mathbf{B}_{2}^{\sim} & \mathbf{C}_{2}^{\sim} \\ \mathbf{B}_{2}^{\sim \mathrm{T}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_{2}^{\sim \mathrm{T}} & \mathbf{0} & \mathbf{T}_{2}^{\sim} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{t}_{12} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{t}_{21} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{1}^{\sim} & \mathbf{B}_{1}^{\sim} & \mathbf{C}_{1}^{\sim} \\ \mathbf{B}_{1}^{\sim \mathrm{T}} & \mathbf{d}_{1}^{\#} & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_{1}^{\sim \mathrm{T}} & \mathbf{0} & \mathbf{T}_{1}^{\sim} \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$
(2.11)

Soustava je navíc doplněna o propojující bloky \mathbf{t}_{12} respektive \mathbf{t}_{21} , přičemž snadno z odvození uvidíme, že bude platit symetrie celé soustavy, specielně, že $\mathbf{t}_{12} = \mathbf{t}_{21}^T$. Dále jsou upraveny bloky $\mathbf{C}_{\mathbf{2}}^{\sim}$ a $\mathbf{T}_{\mathbf{2}}^{\sim}$. Všechny naznačené úpravy jsou symetrické a nyní tyto úpravy popíšeme. V původní soustavě odpovídající 2D síti jsou sousední prvky odděleny jednou hranou. Pokud se mezi tyto prvky zařadí liniový prvek, potom se z původních vnitřních puklinových prvků stavají prvky okrajové ve vztahu k 2D síti a komunikují pouze s prvkem liniovým, který je odděluje. Předpokládejme, že k této situaci doško na k-té hraně oddělující i_1, i_2, \ldots, i_m puklinový prvek. Potom se původní k-tý sloupec bloku $\mathbf{C_2^{\sim}}$ obsahující celkem m nenulových souřadnic rozdělí na celkem m sloupců k_1,k_2,\ldots,k_m které budou mít v uvedeném bloku již pouze jednu nenulovou hodnotu (náležící příslušné pozici stěny i_1 -ního, i_2 -hého, ..., i_m -tého prvku. A pochopitelně i k-tý řádek matice $\mathbf{C}_{\mathbf{2}}^{\mathbf{T}}$ se rozdělí na celkem *m* řádků, které mají v příslušných pozicích bloku $C_2^{\sim T}$ právě jednu nenulovou hodnotu. Uvedeným rozšířením bloků C_2^{\sim} a $C_2^{\sim T}$ dojde současně i k rozšíření bloku T_2^{\sim} , který měl na původní k-té souřadnici na diagonále nulu. Nyní v uvedené matici vznikne celkem $m \times m$ nových pozic. Na mimodiagonálních pozicích budou nuly a na diagonálních vzniklých pozicích budou následující hodnoty:

$$[\mathbf{T}_{\mathbf{2}}^{\sim}]_{k_1k_1} = -\sigma_1 S_1; \ [\mathbf{T}_{\mathbf{2}}^{\sim}]_{k_2k_2} = -\sigma_2 S_2; \ \dots \ [\mathbf{T}_{\mathbf{2}}^{\sim}]_{k_mk_m} = -\sigma_m S_m, \qquad (2.12)$$

což snadno nahlédneme úpravou vztahu (2.10). Navíc do levého sousedícího bloku, který byl původně nulový, přibude nenulový příspěvek do bloku $\mathbf{t_{12}}$. Máli liniový prvek index *j* pak v bloku $\mathbf{t_{12}}$ budou následující nenulové souřadnice:

$$[\mathbf{t_{12}}]_{k_1j} = \sigma_1 S_1; \ [\mathbf{t_{12}}]_{k_2j} = \sigma_2 S_2; \dots; [\mathbf{t_{12}}]_{k_mj} = \sigma_m S_m.$$
 (2.13)

Touto úpravou jsme do modelu zahrnuly skutečnost, že ze 2D bloků může být část vody odváděna vloženým liniovým prvkem. Nyní musíme tuto skutečnost zahrnout i do liniového systému. Uvedené vnější přetoky z puklinového systému tvoří v j-tém liniovém elementu zdroj. Tento zdroj se promítne do střední blokové části liniového systému následujícím způsobem:

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

$$[\mathbf{t_{21}}]_{jk_1} = \sigma_1 S_1; \ [\mathbf{t_{21}}]_{jk_2} = \sigma_2 S_2; \dots; [\mathbf{t_{21}}]_{jk_m} = \sigma_m S_m.$$
(2.14)

A tedy $\mathbf{t}_{12} = \mathbf{t}_{21}^T$. Dále na *j*-tou diagonální pozici bloku $\mathbf{d}_1^{\#}$ zapíšeme zápornou hodnotu součtu $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_m$ násobené velikostí plochy příslušné stěny.

$$\left[\mathbf{d}_{\mathbf{1}}^{\#}\right]_{jj} = -\sum_{k=1}^{m} \sigma_k S_k.$$
(2.15)

Některých situacích je vhodné mít i model, který propojuje 3D prvky a 1D prvky. Například jsou-li v horninovém prostředí budovány systémy tunelů nebo vrtů. Pro tento případ odvodíme pro navzájem komunikující systémy následující složenou soustavu rovnic. Význam jednotlivých bloků byl vysvětlen výše.

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} A_3 & B_3 & C_3 \\ B_3^T & D_3 & 0 \\ C_3^T & 0 & T_3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_{23} & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_{13} & t_{13} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{32} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} A_2 & B_2 & C_2 \\ B_2^T & D_2 & 0 \\ C_2^T & 0 & T_2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_{12} & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{12} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{12} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} A_1 & B_1 & C_1 \\ B_1^T & D_1 & 0 \\ C_1^T & 0 & T_1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Tato úplná komunikace prvků všech dimenzí je zde uvedena pro úplnost výkladů. Ve zvolené aplikaci se vyskytují pouze 3D a 2D prvky. Proto matice pro jednotlivé varianty budou mít tvar viz 2.5 .

vodivost

Část II Příprava vstupních dat modelu

Tato část se zabývá systematickou přípravou vstupních dat modelu pro vybranou lokalitu Cajamarca. Je popsána geologická stavba oblasti, hydrogeologické poměry v oblasti a jsou uvedeny výsledky počítačového modelu - tzv. nulové varianty, která bude v následující části variována změnami okrajových podmínek.

3 Hydrogeologický model Cajamarca

Vyvíjený software pro modelování proudění podzemních vod byl v období 2006-2007 použit pro vývoj hydrogeologického modelu pro oblast Cajamarca.

Pro první etapu řešení hydrogeologických podmínek ve vybraných lokalitách v Peru byla pro zpracování modelu vybrána lokalita Cajamarca. Základem tohoto rozhodnutí byla dostupnost geologických a strukturních dat, které byly pro zpracování modelu k dispozici. Je nutné na tomto místě poznamenat, že zpracování modelu je velmi náročné vzhledem k nedostatečnému množství údajů pro přímé plnění modelu. Přesto je vhodnou metodikou problém řešitelný a jeho řešení postavené tak, aby byl možný další vývoj a ověřování modelu. Ve fázi vývoje modelu bylo nutné řadu údajů o jednotlivých charakteristikách předpokládat a zavést do modelu jako snadno změnitelné hodnoty. Na základě výpočtu řady variant, bude možné uvedený model v budoucnu upřesňovat a kalibrovat, pokud budou k dispozici nové údaje z geologického průzkumu a hydrogeologic-kých měření.

Cílem modelování v počáteční fázi bylo zpracování první varianty modelu vývoje hydrogeologické situace v hlavním aquiferu, který je dominantní pro zdroje termální vody ve sledovaných pramenech, tak aby bylo dosaženo shody modelu s globálními charakteristikami a předpoklady geologů a hydrogeologů. V následné fazi byla potom připravena připravena řada variantních scénářů týkajících se hydrogeologických změn v oblasti pro případ dalšího rozvoje lázeňství v zájmové oblasti.



Obrázek 4: Reliéf krajiny

Na obrázku je vidět celkový pohled na lokalitu se zakreslením umístění jednotlivých hlavních orientačních míst.

3.1 Geologická stavba oblasti

3.1.1 Druhy hornin

Geologická stavba oblasti v okolí města Cajamarca je podrobně popsána ve zprávě 11. Na tomto místě budou uvedeny pouze zásadní skutečnosti uvažované při přípravě a implementaci modelu.

Geologické podloží širšího okolí města Cajamarca tvoří sedimenty triasu a jury. Hlavní horninové celky představují mocné zvrásněné vrstvy spodní a svrchní křídy. Svrchní a spodní terciér je zastoupen jak sedimenty, tak mocnými útvary hornin vulkanického původu (mimo modelované území). Kvartérní sedimenty pánve Cajamarca dosahují 30-60 m. V tabulce 1 jsou shrnuty hlavní horninové typy vyskytující se v zájmové oblasti.

3.1.2 Strukturní stavba

Dominantní strukturou na studovaném území je vrásová stavba, která postihuje prakticky všechny křídové sedimenty na území Peru. Osy vrás a četné násunové plochy jsou orientovány hlavním směrem, který má na studovaném území ZSZ-VJV průběh. Další významné struktury jsou zlomy poklesového a střižného charakteru (cca S-J průběhu), které jsou kolmé na výše zmíněné struktury.

Pro S-J profil modelovaného území (profil znázorněný na obrázku 6) jsou charakteristické následující hlavní struktury (od severu k jihu):

- Antiklinálu nad Yumagualem (1) Jádro antiklinály je tvořeno formací křídových sedimentů Chimú, která je vytažena do nadmořských výšek až 3000-3500 mnm. Puklinový systém (vrásová kliváž) je v těchto horninách velmi dobře vyvinutý. Vzhledem k tomu, že se jedná o téměř čistě křemenné horniny s minimálním množstvím ostatních minerálů nejsou tyto pukliny vyplněny žádnými zvětralinami a jsou tedy pro vodu dobře propustné. Z geologické mapy je patrné, že struktura antiklinály pokračuje dále na východ, avšak v údolí řeky Río Cajamarca je již erodovaná a zakrytá kvartérními uloženinami.
- Synklinála (2) Struktura antiklinály plynule přechází směrem na sever do synklinály, kdy na svahu nad Cajamarskou depresí postupně vycházejí horniny formací Santa, Carhuaz, Farrat, Inca a Chúlec, který tvoří jádro synklinály. Dále na západ pak pokračuje sedimentární sekvence až po nejmladší vápence formace Cajamarca v jádru synklinály.

Jméno (označení)	Popis horniny (mocnost)		
Formace Chimú (Ki-chi)	Ve spodní části střídání pískovců, kvarcitů a lutitů, ve svrchní části mocné lavice bílých kvarcitů (600 m)		
Formace Farrat (Ki-f)	Kvarcity a středně až hrubozrnné bílé pískovce (500 m)		
Formace Santa (Ki-sa)	Střídání lutitů, slínovcových vápenců a tmavě šedých pískovců (100-150 m)		
Formace Carhuaz (Ki-ca)	Střídání červených až zelených pískovců a šedých lutitů (500 m)		
Formace Inca (Ki-in)	Vápenaté pískovce, železité lutity a vrstvy kvar- citů (max.100 m)		
Formace Chúlec (Ki-chu)	Písčité fosiliferní vápence, vápenaté lutity a béžovohnědé slínovce (200-250 m)		
Formace Pariatambo (Ki-pa)	Lutity s tenkými vrstvami černých bituminóz- ních vápenců, v některých polohách jsou nodule rohovců a dolomitů (150-200 m)		
Formace Yumagual (Ks-yu)	Sekvence slínovců a šedých vápenců s lokálními fosiliferními polohami a vápenatými nodulemi (700 m)		
Formace Quilquiňan,	Masívní nodulární vápence s vložkami slínovců		
Formace Majarrun	a žlutých lutitů, na nich sekvence jemně zvrstve-		
(Ks-qm)	ných nodulárních vápenců se slínovci, nejvyšší vrstvy světlé lavice vápenců s písčitými lutity a slínovci s hojnými fosíliemi (500 m)		
Formace Cajamarca (Ks-ca)	Tmavě šedé až namodralé masivní vápence s tenkými polohami lutitů a slínovců stejné barvy. Tvoří morfologicky významné lavice a svahy s krasovými jevy (600-700 m)		
Formace Celendín (Ks-ce)	Střídání lutitů, slínovců a tenkých poloh vápenců světlé barvy (200 m)		

Tabulka 1:	Hlavní	horninové	typy
------------	--------	-----------	------

- Násunový zlom vedoucí údolím Río Chonta (3) (město Llacanora)

 Severovergentní násun je lokalizován ve formaci Carhuaz tvořené lehce deformovatelnými jemnozrnnými pískovci, prachovci a jílovci, které jsou nasunuty na tvrdší a erozi odolné křemenné pískovce formace Farrat. Díky tomuto násunovému zlomu může dojít v hloubce ke kontaktu pískovců formace Farrat s hlavním aquiferem (kvarcity Chimú) a následnému zvětšení infiltrační oblasti o jižní křídlo antiklinály Banos de Inca.
- Antiklinála Baňos del Inca (4) Struktura antiklinály Banos de Inca je dobře známá z předcházejících prací. Křídla antiklinály jsou tvořena z morfologicky výrazných vrstev pískovců a kvarcitů formace Farrat zatímco jádro antiklinály obnažuje starší a méně odolné prachovce, pískovce a jílovce formace Carhuaz, které jsou silně erodované. Jistá je tvorba puklin paralelních s osou antiklinály a úklony přibližně kolmými na vrstevní plochy spojená s vrásněním. Takové pukliny byly pozorovány v pískovcích a kvarcitech formace Farrat a předpokládáme je ve všech formacích směrem do podloží.
- Synklinála nad Otuzcem (5) Antiklinála Baňos del Inca přechází na severu kontinuálně do synklinály Otuzco. V profilu je možné pozorovat celou sekvenci formací Inca, Chúlec, Pariatambo, Yumagual, Quilquinan-Majarrun, Cajamarca a Celendín ve středu synklinály. Středem synklinály prochází zlom paralelní s osou vrásy.

V podélném profilu SZ-JV (profil znázorněný na obrázku 7), který je veden násunovou plochou jižně od antiklinály Baňos del Inca, jsou zvýrazněné S-J zlomy ohraničující Cajamarskou depresi z východu i ze západu. Tyto zlomy pokračují jak na sever do vulkanických hornin, tak na jih, kde postihují sedimenty formace Chimú. S velkou pravděpodobností jde o systém paralelních zlomů a subvertikálních puklin, které jsou pro vodu velmi dobře propustné v pískovcích a kvarcitech (formace Chimú a Farrat), ale méně propustné v prachovcích a jílovcích (formace Carhuaz).


Obrázek 5: Geologická mapa modelované oblasti s vyznačením pozice některých profilů (červeně), struktury severo-jižního poklesového zlomu (černé linie), pozice pramenů (modře) a vymezením oblasti (bílá kontura).



Obrázek 6: Jeden ze severo-jižních profilů modelované oblasti.



Obrázek 7: Západo-východní profil modelované oblasti

3.1.3 Vztah pozorovaných struktur a hydrogeologických poměrů

Z výše zmíněného popisu vyplývá, že nejvhodnějším kolektorem vody jsou na studovaném území dvě mocné jednotky křemenem bohatých sedimentů, a to formace Chimú a Farrat, obě mocné cca 500 m. Mezi nimi leží dvě formace dosahující celkem cca 650 m, které jsou tvořeny zejména prachovci, jílovci a břidlicemi, které jsou pro vodu prakticky nepropustné. Na jihu území se formace Chimú nachází na povrchu a zde zřejmě dochází k hlavní infiltraci povrchových vod do tohoto kolektoru. Infiltrační oblast může být zvětšena o jižní křídlo antiklinály Baňos del Inca, která se podél násunového zlomu dostává do přímého kontaktu s hlavním kolektorem - kvarcity Chimú. Směrem na sever se díky struktuře synklinály kvarcity Chimú noří do větších hloubek. Na severu jsou zřejmě sedimenty překryty nepropustnými vulkanickými horninami, které znemožňují další pohyb podzemní vody.

Důležitou roli pro výstup termálních vod na povrch hraje severojižní zlom, který probíhá celým údolím od jihu (antiklinála Yumagual) až k severu (vulkanické horniny). Kromě toho, že tento zlom významným způsobem usnadňuje cirkulaci podzemní vody, slouží také jako přívodní struktura pro plyny a teplo z vulkanických center. Tento systém S-J zlomů v kombinaci se SZ-JV směrem antiklinály slouží jako výstupová cesta pro termální vody pramenů Perolitos i Tragadero.

3.2 Hydrogeologické poměry v oblasti

Hydrogeologické poměry v okolí města Cajamarca jsou podrobně popsány ve zprávě 11. Na tomto místě budou uvedeny pouze základní skutečnosti vztahující se přímo k implementovanému modelu.

V zájmové oblasti se vyskytují dva významné termální prameny (respektive pramenní skupiny) a to prameny Tragadero a Perolitos.

- Tragadero Pramenní skupina (proplyněná) v hotelu Laguna Seca (Los Baňos del Inca). Prameny tvoří samostatnou skupinu (vyšší vzhledem ke skupině Perolitos) a vyvěrají poblíž úpatí svahu okraje pánve Cajamarca. Teplota 69°C. Průtok 30 l/s. Nadmořská výška 2695 mnm.
- Perolitos Pramenní skupina (proplyněná) v centru Los Baňos del Inca. Prameny tvoří samostatnou skupinu (nižší vzhledem ke skupině Tragadero) a vyvěrají poblíž řeky Rio Chonta. Teplota 60°C. Průtok 50 l/s. Nadmořská výška 2689 mnm.

Na formování obou pramenů má zásadní význam S-J zlom probíhající celou pánví, který se v místě vývěru kříží s osou antiklinály Baňos del Inca.

Současně s přípravou modelu byly zpracována data vypovídající o hydrologické situaci v zájmové oblasti.

K dispozici jsou data o střední relativní vlhkosti a vodní srážky za několik let, které jsou v průběhu celého roku vysoké a dotují vodou sledovanou oblast. Zpracovaná hydrologická data budou postupně využita k další verifikaci modelu.



Obrázek 8: Průměrné srážkové dotace v [mm/měsíc] v oblasti Cajamarca

Odchylky srážkových bilancí v oblasti.

Průměrná SRV v oblasti Cajamarca

Pro účely matematického modelování je možné rozdělit zájmovou oblast na několik základních horninových a strukturních typů (od podloží směrem nahoru):

- Nepropustné podloží (jurské souvrství Chicama, nevychází na povrch).
- Hlavní akvifer hydraulicky silně propustná vrstva (kvarcity a kvarcitické pískovce Chimú), která je v řezu přítomna na celém území a v jeho jižní části vychází na povrch. Výchozy formace Chimú jsou považovány za hlavní infiltrační oblast. Jedná se o vrstvu, která je zvrásněná. V oblasti antiklinály Baňos de Inca dochází k migraci vody po puklinovém systému a výtoku na zemský povrch. Ve střední části profilu je tato vrstva porušena násunovým zlomem, který ji s největší pravděpodobností posunul tak, že leží v přímém kontaktu s další propustnou vrstvou pískovci Farrat.
- Nepropustná vrstva, která představuje izolátor (jílovce a prachovce souvrství Santa a Carhuaz)



Obrázek 9: Průměrné srážkové bilance v oblasti Cajamarca

- Propustná vrstva (pískovce Farrat), která do podzemního hydogeologického systému spojeného s termálními prameny zasahuje pravděpodobně pouze v místě násunového zlomu, kde je v kontaktu s hlavním akviferem kvarcity Chimú a představuje další možnou infiltrační oblast.
- Další nadložní horniny, které jsou znázorněné v profilu nemají na hydrogeologický model žádný vliv.
- Významným strukturním prvkem je kromě puklinové zóny v ose antiklinály i severojižní systém poklesových zlomů, na kterých jsou lokalizované termální prameny.

Prvotní koncepce modelu proudění podzemní vody, který byl pro zájmovou oblast zpracován, byla na základě terénního průzkumu navržena pracovníku ČGS. Na základě poskytnutých údajů byl potom vytvořen model, který se vyznačuje:

- redukcí modelované oblasti pouze na propustné vrstvy, které jsou v kontakty s hlavním aquiferem, a tedy vyřazením nepropustných vrstev
- zahrnutím struktury severo-jižního poklesového zlomu

Specifikou modelu je právě propojení objemových (hydrogeologické vlastnosti hornin) a plošných prvků (zlomy).

3.3 Příprava sítě

Modelovaná oblast byla vymezena s respektováním základních strukturních prvků tak, aby bylo dále vhodným způsobem možné zadávat okrajové podmínky. V půdorysu má oblast tvar téměř obdélníka. Zájmová oblast byla omezena hraničními plochami následujícím způsobem:

- Na jihu je modelovaná oblast ohraničena osovou rovinou antilinály nad Yumagualem.
- Ze severu je modelovaná oblast omezene osovou rovinou synklinály nad Otuzcem.
- Západní hranice modelované oblasti byla zvolena v místech západního cípu výchozů formace Chimú.
- Na východě je hranice zvolena v místech, kde jsou výchozy formace Chimú převážně překryty kvartérními zvětralinami.

Vymezení modelované oblasti v geologické mapě je zřejmě z obrázku 5 V rámci takto vymezené oblasti byla potom vytvořena geometrie modelovaných strukturních prvků (vrstva formace Chimú, část formace Farrat, která je v přímém kontaktu s formací Chimú, severo-jižní poklesový zlom). Geometrie modelované oblasti je patrná z obrázku 10. Vztah mezi modelovanou oblastí a povrchem je vizualizován na 12

Pro účely simulace proudění podzemních vod v oblasti bylo potom generováno několik sítí. Sítě byly vytvořeny v programu GMSH. Jednotlivé sítě se liší celkovým počtem elementů. Sítě s nižším počtem elementů byly používány především ve fázi vývoje modelu. Výsledné simulace byly potom prováděny a jsou dále prezentovány na síti, která má celkem 7972 uzlů a 32512 elementů (z toho 656 trojúhelníkových elementů, ostatní čtyřstěny), na obrázku 11 je uvedena ukázka této sítě.

3.4 Vstupní data modelu

Pro účely generování vstupních souborů modelu byl implementován jednoúčelový program, který načte síť vytvořenou generátorem identifikuje jednotlivé strukturní prvky v načtené síti, určí jednotlivé části hranoce modelované oblasti a vytvoří sadu souborů, které obsahují data pro výpočet modelu tedy soubor sítě, soubor okrajových podmínek a soubor fyzikálních vlastností.



Obrázek 10: Geometrie modelované oblasti.



Obrázek 11: Síť používaná pro výpočet.



Obrázek 12: Povrch a modelovaná oblast.

3.4.1 Okrajové podmínky

Okrajové podmínky byly v soudadu s koncepcí modelu zadávány na jednotlivých okrajových stěnách sítě následujícím způsobem:

- Na okrajových stěnách, které leží na severním okraji (osová rovina synklinály nad Otuzcem) modelované oblasti byla zadána homogenní Neumannova okrajová podmínka (nulový přetok ve směru vnější normály).
- Na okrajových stěnách, které leží na jižním okraji (osová rovina antiklinály nad Yumagualem) modelované oblasti byla zadána homogenní Neumannova okrajová podmínka (nulový přetok ve směru vnější normály).
- Přes okrajové stěny, které leží na západním okraji oblasti předpokládáme zanedbatelný (prakticky nulový) tok ve směru vnější normály (směrem na západ se nevyskytují další výchozy formace Chimú), tedy na příslušných okrajových stěnách sítě je zadávána homogenní Neumannova okrajová podmínka popřípadě Newtonova okrajová podmínka s malou hodnotou koeficientu přestupu.
- Přes okrajové stěny, které leží na východním okraji oblasti předpokládáme zanedbatelný (prakticky nulový) tok ve směru vnější normály, tedy na příslušných okrajových stěnách sítě je zadávána homogenní Neumannova okrajová podmínka popřípadě Newtonova okrajová podmínka s malou hodnotou koeficientu přestupu.
- Na okrajových stěnách sítě, které tvoří dolní okraj modelované vrstvy (kontakt modelované vrstvy s nepropustným podložím), je zadávána ho-

mogenní Neumannova okrajová podmínka (nulový tok ve směru vnější normály).

- Na okrajových stěnách sítě, které jsou v místech výchozů horninových vrstev na zemský povrch (výchozy Farrat, výchozy Chimú) je zadávána Dirichletova okrajová podmínka.
- Na okrajových stěnách sítě, které tvoří horní okraj modelované vrstvy v místech, kde jsou tyto vrstvy překryty praktický nepropustnými horninami je zadávána homogenní Neumannova okrajová podmínka popřípadě Newtonova okrajová podmínka s malou hodnotou koeficientu přestupu.
- Na okrajových stěnách sítě v místech, kde je lokalizován pramen je zadáváva Dirichletova okrajová podmínka.

V rámci jednotlivých částí hranice modelované olasti potom může být při kalibraci modelu uvažována další diferenciace.

3.4.2 Fyzikální vlastnosti prostředí

Zadávané fyzikální vlastnosti prostředí (v případě modelu proudění jsou to jednotlivé prvky tenzoru vodivosti prostředí), jsou zadávány jako hodnoty konstantní na jednotlivých elementech sítě a respektují základní geologické strukturní prvky obsažené v modelované oblasti.

- Elementy horniny formace Chimú v jižní části modelované oblasti vystupují tyto horniny na zemský povrch, jedná se o silně narušenou horninu, s četnými otevřenými puklinami dobře propustnými pro vodu. V ose antiklinály lze potom předpokládat výrazné rozevření puklin a zvýšení vodivosti především ve vertikálním směru, v puklinové zóně je potom zadávaná vodivost o jeden řád vyšší.
- Elementy horniny formace Farrat dle odhadu hydrogeologa lze předpokládat nižší vodivost (zhruba o jeden řád) než v případě horniny Chimú.
- Elementy poklesového zlomu vodivost elementů uvažovaného zlomu závisí opět na hornině v dané části zlomu. Pokud uvažujeme elementy zlomu identifikovaně v místě nepropustných vrstev (prachovce, jílovce) jedná se (dle odhadu geologa, hydrogeologa) pravděpodobně o zajílovanou a tedy nepropustnou část zlomu příslušné elementy mají nízkou vodivost. Uvažujeme-li elementy zlomu identifikované v místě propustných vrstev je dle odhadu geologa a hydrogeologa vodivost o dva řády vyšší než v příslušné hornině. vodivost je dále vyšší v místech, kde se navzájem protínají dva hydrougeologicky významné prvky a to osa antiklinály a zlomová

zóna – v příslušných místech zlomu je potom zadávána prpustnost o tří řády vyšší než v bloku příslušné horniny.

Základní varianta modelu, vzhledem k velmi hrubé struktuře sítě, neuvažuje změnu vodivosti s hloubkou, je uvažován pouze vliv synklinálních a antiklinálních útvarů na změnu vodivosti. V rámci jednotlivých formací a struktur může být uvažován i pokles vodivosti s hloubkou. Protože měřená data nebyla pro tuto oblast k dispozici, bylo vhodné zadávat data podle doporučení geologů a hydrogeologů. Metodika stanovení hydraulické vodivosti, hodnocení vlivu teploty a aditivní tlakové výšky na výsledný charakter proudění může být provedena dle následujících vztahů.

Hydraulická vodivost Hydraulická vodivost je daná tenzorem jehož jednotlivé složky jsou závislé jednak na daném typu horninového materiálu \mathbf{K}_{mat} , který může být pro různé směry různý, a jednak na vzdálenosti od povrchu v daném místě, který je určen $z_p z_T^e$ a kalibračním parametrem p_1 . Tyto hodnoty jsou dále upraveny na podle míry zvrásnění aquiferu, pro který je vodivost stanovována. Tedy budeme předpokládat, že další úprava koeficientu hydraulické vodivosti je úměrná druhé derivaci plochy zvrásnění v daném místě označené symbolem Δ_2 a rozdílem z-tových ouřadnic středu vrstvy a souřadnice těžiště elementu v daném místě. Konstanta úměrnosti je současně kalibračním parametrem a je označena symbolem p_2 pro horizontální směry a symbolem p_3 pro vertikální směr. Hodnoty hydraulické vodivosti tedy můžeme vypočítat na základě následujících vztahů:

т,

$$K_{xx}^{e} = p_{1} \frac{K_{x-mat}}{|z_{p} - z_{T}^{e}|} + p_{2} \Delta_{2} \cdot (z_{c} - z_{T}^{e})$$

$$K_{yy}^{e} = p_{1} \frac{K_{y-mat}}{|z_{p} - z_{T}^{e}|} + p_{2} \Delta_{2} \cdot (z_{c} - z_{T}^{e})$$

$$K_{zz}^{e} = p_{1} \frac{K_{z-mat}}{|z_{p} - z_{T}^{e}|} + p_{3} \Delta_{2} \cdot (z_{c} - z_{T}^{e})$$
(3.1)

Teplota Další veličinou, která ovlivňuje proudění je teplota. Pro výpočet hodnot teploty v těžištích elementů můžeme využít následujicího vztahu, který je též založen na předpokladu, že teplota s hloubkou roste. Pro gradient růstu můžeme použít parametr p^* , který nastavíme pro oblast například podle tektnické aktivity, měření apodobně. Tato veličina nebyla dopusud pro model aplikována. Studium vlivu teploty na změny proudění je připraveno jako budoucí práce v otázkách posuzování citlivosti. Teplotu elementu je možné určit následujícím vztahem

$$\vartheta = \vartheta_p + p^* \left| z_p - z_T^e \right| \tag{3.2}$$

- $P^{\ast}~$ gradient vzrůstu teploty v závislosti na hloubce umístění elementu
- z_p z souřadnice povrchu terénu
- z_T^e z-tová souřadnice těžiště elementu
- ϑ_p teplota povrchu terénu

Aditivní tlaková výška

Předpokládáme, že teplota podzemí je v daném proudění již ustálená. Na základě určené teploty model zahrnuje i tlakové změny v daném místě vyvolané jednak změnou hustoty vody v souvislosti s její objemovou roztažností a dále pak i přidáním tlakové změny dané též vlivem roztažností v odporovém prostředí horniny.

Tedy v souvislosti s roztažností vody v termálním prostředí horniny můžeme pro změnu tlakové výšky použít následující empirický vztah

$$p = \frac{\pi}{\rho g} + \frac{c_{kap}}{\|\mathbf{K}\|} \left(\vartheta - \vartheta_{ref}\right) = \frac{\pi}{\rho_{ref}g} \left[1 - \beta \left(\vartheta - \vartheta_{ref}\right)\right] + \frac{c_{kap}}{\|\mathbf{K}\|} \left(\vartheta - \vartheta_{ref}\right)$$

S využitím (3.2) odvodíme pro přidaný tlak následující vzorec

$$p_{ad} = p^* \left[\frac{c_{kap}}{\|\mathbf{K}\|} - \frac{\pi}{\rho_{ref}g} \beta \right] (z_p - z_T^e)$$
(3.3)

Výše uvedené opravy vztahů závisející na změnách teplotního pole nebyly v předložené verzi modelu využity z důvodu značné složitosti naplnění komplikované sítě. Aplikace uvedených vztahů se předpokládá v navazující etapě v průběhu další kalibrace modelu.

3.4.3 Topologie sítě

Používaný model vychází ze smíšené hybridní formulace. Pro sestavení výsledné matice je proto nutné znát topologii sítě (tj. vzájemnou sousednost elementů). Soubor topologie pro zadanou síť je generován programem NGH.

Specifikem připraveného modelu je kombinace elementů různé dimenze (3D horninových vrstev a 2D zlomu). Tato skutečnost na jedné straně snižuje možnou nízkou regularitu sítě v případě, že by zlomové útvary byly modelovány pomocí 3D elementů, na druhé straně ovšem do modelu vnáší další fyzikální charakteristiky (koeficienty přestupu mezi elementy různé dimenze). Tyto koeficienty mají obdobný význam jako koeficienty přestupu Newtonovy okrajové podmínky. V případě, že modelujeme výrazně propustný zlom a chceme zajistit dobrou komunikaci mezi 2D a 3D elementy sítě je třeba použít vysoké hodnoty přestupních koeficientů (10^4).



Obrázek 13: Geometrie modelované oblasti.

3.5 Výsledky počítačového modelu - nulová varianta

Grafické znázornění rozložení jednotlivých vypočtených veličin (tlakových výšek, piezometrických výšek, vektorů rychlostí toku) jsou uvedeny na obrázcích 13, 14, 15.

Cílem modelování nulové varianty bylo zpracování metodiky přípravy sítě pro vymezenou oblast s uvážením specifických požadavků simulované reality, vývoj metodiky přípravy vstupních dat pro naplnění modelu a implementace první varianty modelu hydrogeologické situace v hlavním aquiferu modelované oblasti. Za účelem naplnění stanovených cílů bylo postupně provedeno:

- rozbor modelované problematiky
- výběr modelované oblasti, studium výsledků geologů a hydrogeologů
- byla připravena metodika generovaní sítě pro danou oblast,
- byla připravena metodika generování vstupních dat modelu,
- byla realizována první varianta modelu vymezené oblasti.

Při realizaci modelu byly využity výsledky předchozích prací geologů a hydrogeologů. I přes tato poskytnutá data se skupina zabývající se modelováním musela potýkat s řadou nejistot a při realizaci první varianty modelu bylo třeba vzít v úvahu velkou řadu zjednodušení, abychom dosáhli výsledků odpovídajících představám o skutečném proudění podzemních vod v modelované oblasti.



Obrázek 14: Síť používaná pro výpočet.



Obrázek 15: Síť používaná pro výpočet.

Nutno podotknout, že vývoj konkrétního modelu je práce velmi specifická, je třeba vzít v úvahu řadu skutečností významných pro danou konkrétní modelovanou lokalitu. Teprve po jisté době testování modelu, zjišťování citlivosti výsledků na změnu vstupních dat a podobně, lze přikročit ke kvalifikovanému zhodnocení celého modelu. Z časových důvodů byla aktuálně realizována pouze první varianta modelu, jejíž výsledky jsou v této zprávě prezentovány. Prezentovaný model byl realizován s četnými zjednodušeními a nelze jej v této fázi považovat za zcela definitivní. V případě dalšího zájmu o výsledky modelování v rámci tohoto projektu bude postupně provedeno jeho zpřesnění, bude zpracována citlivostní analýza a vypracována řada variantních scénářů vývoje hydrogeologické situace. vodivost

_{Část III} Citlivost modelu na změnu vstupních dat

Tato část obsahuje vyjádření numerické citlivosti modelu na vybrané vstupní parametry. Nejprve budeme měnit hydraulickou vodivost aquiferu Chimú, která byla zadána v nulové variantě na základě zkušeností a návrhu hydrogeologů. Následující výpočty mají ověřit citlivost výsledků na celkovou změnu hydraulické vodivosti vyjádřenou koeficientem. Dále budeme měnit hodnotu zadávající Dirichletovu okrajovou podmínku. Tato změna vyvolá pokles respektive růst infiltrace povrchové vody do aquiferu. Změny se projeví celkovou změnou stavových veličin. Speciálně budou sledovány změny proudění a průtoků v okolí vývěrů pramenů. To jsou ve sledované oblasti konkrétní měřitelné hodnoty a naším cílem je ověřit vliv "nepřesností" zadaných vlastností aquiferu na změny těchto měřených hodnot a konečně na základě výsledků posoudit možnosti úprav vstupních veličin pro kalibraci modelů. Volba parametrů zadávající okrajové podmínky a vlastnosti horninového prostředí bude provedena v širokém rozmezí, které bude v některých případech odpovídat přírodním podmínkám. Cílem studia citlivosti tedy je i zkoumání chování modelů při zadání "extrémních" parametrů.

4 Vliv změny hodnot hydraulické vodivosti

Nejprve budeme sledovat změny výsledků při celkové změně hydraulické vodivosti oblasti a budeme je porovnávat s výsledky základní - nulové varianty. Všechna ostatní vstupní data úlohy zůstanou zachována shodná se zadáním nulové varianty. Pro tyto změny hydraulické vodivosti vypočteme sadu úloh a vyhodnotíme jednak odchylky stavových veličin na výpočetní síti, ale i funkcionály výsledků vystihující citlivost na vstupní změny.

Pro dané rozložení hydraulické vodivosti **K** definované nulovou variantou vypočteme několik rozdělení κK_{zz} pro studium vlivu změny vertikální vodivosti horninového prostředí na změny stavových veličin, kde κ je parametr změny

vodivosti z intervalu (0,8 ; 1,2), $\kappa \in (0,8;1,2)$. Dále vypočteme i několik rozložení celkové změny hydraulické vodivosti podle vztahu $\kappa \mathbf{K}$. Pro nejvyšší a nejnižší hodnotu parametru zobrazíme výsledky změn jednotlivých stavových proměnných **U**, **P** na výpočetní síti. Změny stavových veličin budou hodnoceny i pro jednotlivé změny parametru κ tak, aby bylo možné studovat tendence vývoje výsledků. Tedy označíme-li **U**₀, **P**₀ rozložení stavových veličin pro nulovou variantu a **U**_{κ}, **P**_{κ} rozložení stavových veličin pro změnu hodnoty rozložení hydraulické vodivosti vyvolanou parametrem κ .

4.1 Vliv změny hodnot hydraulické vodivosti na celkovou změnu stavových veličin

Stavové veličiny vykreslíme pro krajní hodnoty parametru κ a nulovou variantu. Tedy pro $\kappa = 0, 8$; $\kappa = 1, 0$ a $\kappa = 1, 2$. Výsledky pro stav průtoků v oblasti jsou znázorněny na obrázcích 16, 17 a 18 a pro piezometrickou výšku na obrázcích 19, 20 a 21.

Na obrázcích 16, 17 a 18 můžeme sledovat postupný nárůst pole toků v celé oblasti při zvyšování hydraulické vodivosti. Postupně roste i vydatnost pramenů.

Na obrázcích 19, 20 a 21 je zřejmý postupný nárůst pole tlakové výšky v celé oblasti při zvyšování hydraulické vodivosti. Postupně roste i vydatnost pramenů.

Označme pro m-tý prvek sítě (stěny elementu pro průtoky nebo těžiště elementu pro piezometrickou výšku):

$$\Delta_{\kappa} U^m = \left| U^m_{\kappa} - U^m_0 \right|,$$

$$\Delta_{\kappa} P^m = \left| P^m_{\kappa} - P^m_0 \right|,$$

Tyto změny stavových veličin vykreslíme pro krajní hodnoty parametru κ . Tedy pro $\kappa = 0, 8$ a $\kappa = 1, 2$. Výsledky pro minimální variantu tj. pro $\kappa = 0, 8$, pro nulovou variantu a pro maximální variantu tj. pro $\kappa = 1, 2$ jsou znázorněny na obrázcích 22 a 23 pro průtoky a 24 a 25 pro piezometrické výšky.

Na obrázcích 22 a 23 je viditelné obrácení pole toků v oblasti pramenů při zvyšující se hydraulické vodivosti. Obrázek dokumentuje v jakém intervalu se má nacházet odpovídající volba.

Na obrázcích 24 a 25 je viditelná změna tlakové výšky a obrácení pole toků v oblasti pramenů při zvyšující se hydraulické vodivosti. Na obrázku je viditelné i zmenšení infiltrace na části hranice vlivem malé vodivosti.

Komentář: z uvedených výsledků je zřejmé, že změny stavových veličin jsou velmi málo citlivé i na relativně značné změny hydraulické vodivosti.



Obrázek 16: Pole toků při minimální hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 17: Pole toků při 0-vé variantě hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 18: Pole toků při maximální hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 19: Pole tlakových výšek při minimální hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 20: Pole tlakových výšek při 0-vé variantě hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 21: Pole tlakových výšek při maximální hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 22: Změna pole toků při minimální hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 23: Změna pole toků při maximální hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 24: Změna pole tlakových výšek při minimální hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 25: Změna pole tlakových výšek při maximální hydraulické vodivosti horniny

Dále budeme hodnotit relativní změny stavových veličin způsobené vlivem výše stanovených 20 % -ních změn hydraulické vodivosti. Pro tento účel vypočteme součet čtverců rozdílů stavových veličin vážený převrácenou hodnotou stavové veličiny a počtu složek stavové veličiny. Tedy vypočteme postupně

$$\Delta_{\kappa} G_U(\kappa) = \frac{1}{|\kappa - 1| M_U} \sqrt{\sum_{m=1}^{M_U} \frac{(U_{\kappa}^m - U_0^m)^2}{(U_0^m)^2}}$$
(4.1)

$$\Delta_{\kappa} G_P(\kappa) = \frac{1}{|\kappa - 1|M_P} \sqrt{\sum_{m=1}^{M_P} \frac{(P_{\kappa}^m - P_0^m)^2}{(P_0^m)^2}}$$
(4.2)

Vypočtené hodnoty jsou znázorněny v tabulkách 2 pro změny vertikálních hodnot vodivosti a v tabulkách 3 pro celkové změny vodivosti. Výsledky jsou dále zpracovány v grafech niže.

Δ HP / G	G(U)	G(P)
- 20 %	0,000536442	0,005909228
- 15 %	0,000537954	0,005826841
- 10 %	0,000538115	0,005578948
-5 %	0,000540919	0,005679653
0 %	0	0
5 %	0,000538071	0,004909814
10 %	0,000540843	0,005022699
15 %	0,000540669	0,004824419
20 %	0,000541962	0,004786103

Tabulka 2: Citlivost na změnu HP v%rovnoměrně ve všech směrech

Dále zpracujeme grafické závislosti:

$$\Delta_{\kappa}G_U = \Delta_{\kappa}G_U(\kappa), \qquad (4.3)$$

$$\Delta_{\kappa}G_P = \Delta_{\kappa}G_P(\kappa) \,. \tag{4.4}$$

Výsledky jsou dále zpracovány v grafech 26, 28, 27 a 29. Postupně pro hodnoty $\kappa = 0, 80$; 0, 85; 0, 90; 0, 95; 1, 0; 1, 05; 1, 10; 1, 15; 1, 20;.

Z výsledků je patrné, že změna hydraulické vodivosti v rozsahu do 20% ovlivní rychlost toku zhruba o 0.05%. Ve vztahu k provedeným změnám se jeví změny sledovaných výstupních parametrů velmi stabilní. Obdobně je to potom

Δ HP / G	G(U)	G(P)
- 20 %	0,00041037	0,011857258
- 15 %	0,00040652	0,011630393
- 10 %	0,000401505	0,01158385
- 5 %	0,0003993	0,01119501
0 %	0	0
5 %	0,000386972	0,011425822
10 %	0,000385192	0,011056301
15 %	0,000380643	0,011005711
20 %	0,000377665	$0,010805\overline{231}$

Tabulka 3: Citlivost na změnu HP v%v preferovaném směru

s citlivostí tlakových poměrů v oblasti, zde jsou zaznamenané odchylky zhruba 1% od "nulové varianty". Další snižování popřípadě zvyšování hydraulické vodivosti nebude očividně jakýmkoli způsobem dále ovlivňovat sledované výstupní parametry.



Obrázek 26: Graf závislosti funkce ${\cal G}(U)$ na změnách hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 27: Graf závislosti funkce ${\cal G}(U)$ na směrových změnách hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 28: Graf závislosti funkce ${\cal G}(P)$ na změnách hydraulické vodivosti horniny



Obrázek 29: Graf závislosti funkce ${\cal G}(P)$ na směrových změnách hydraulické vodivosti horniny

4.2 Vliv změny hodnot hydraulické vodivosti na lokální změny stavových veličin

Dále se budeme zajímat o lokální změny stavových veličin vlivem změn hydraulické vodivosti. Pro tyto studie změn průtoků byly stanoveny následující zájmové lokality: Především prameny, okolí pramenů (včetně tzv. divokých vývěrů), hranice výchozů Chimú a hranice výchozů Farrat. Zjištěná závislost je uvedena v tabulce 4 a poté jsou vykreslena v grafu na obrázku 30.

$\kappa/Misto$	Pramen	Okolí	Chimu	Farrat
		pram.		
-0,20	66,881	2,439	-109,405	4,389
-0,15	71,336	2,660	-115,660	4,739
-0,10	75,833	2,892	-121,822	5,100
- 0,05	80,311	3,119	-128,005	5,458
0,00	84,831	3,357	-134,097	5,827
0,05	89,329	3,590	-140,220	6,193
0,10	93,867	3,832	-146,253	6,569
0,15	98,379	4,069	-152,322	6,941
0,20	102,933	4,315	-158,303	7,324

Tabulka 4: Citlivost toků ve vybraných částech sítě na změnu HP



Obrázek 30: Graf závislosti vydatnosti pramene na na změnu HP

Studujeme-li změny vydatnosti pramenů při změnách parametru σ v kontaktní zóně zlomu vyjádřené Newtonovou okrajovou podmínkou dostaneme hodnoty toků ve zvolených lokalitách, které jsou uvedeny v následující tabulce 5.

σ / Místo	Pramen	Okolí	Farrat	Chimú
		pram.		
1	24,7	-11,3	2,84	-99,0
100	69,1	-0,22	6,37	-125,5
1000	80,32	2,39	6,05	-131,8
10000	84,8	3,54	5,82	-134,0
100000	85,7	3,53	5,78	-134,5

Tabulka 5: Vliv změny ko
eficientu přestupu mezi 2D a 3D elementy na bilanci vod v některých čás
tech sítě



Obrázek 31: Graf závislosti vydatnosti pramene na změnách koeficientu přestupu mezi 2D a 3D elementy

5 Vliv změny hodnot Dirichletovy okrajové podmínky

Dále budeme sledovat změny výsledků při změnách zadávání Dirichletovy okrajové podmínky. Tento typ podmínky je zadán na částech aquiferu Chimú, kde tento vystupuje na povrch. Hodnota okrajové podmínky se určí jako výška hladiny podzemní vody. Výška je stanovena v dané oblasti odhadem a právě tato okrajová podmínka určuje pro nulovou variantu modelu množství infiltrace povrchové vody, neboť na ostatních částech hranice zájmové oblasti jsou zadány vesměs homogenní Neumannovy okrajové podmínky. Do množství infiltrované vody je nutné započítat i infiltraci povrchové vody stékající z hor do míst, kde geologická vrstva Chimú vystupuje na povrch. To můžeme zajistit "vhodnou" volbou Dirichletovy okrajové podmínky. Budeme měnit hodnotu Dirichletovy podmínky, která je v nulové variantě zadána funkcí P_D . Zvolíme interval, ve kterém budeme hodnotu Dirichletovy podmínky měnit, tedy například $(P_D + \prod_{min}, P_D + \prod_{max})$, kde \prod_{min} je zvoleno následovně $\prod_{min} = -8$ a \prod_{max} takto $\Pi_{max} = 8$. Hodnotu Dirichletovy podmínky budeme měnit zavedením parametru ℓ z intervalu (-1,1). Tedy podmínka bude zadána hodnotou parametru ℓ takto:

$$P_{D,\ell}^- = P_D + \ell \Pi_{min}$$

respektive

$$P_{D,\ell}^+ = P_D + \ell \Pi_{max} \, .$$

Všechna ostatní vstupní data úlohy zůstanou shodná se zadáním nulové varianty. Budeme měnit pouze hodnotu Dirichletovy okrajové podmínky. Pro tento typ variace vypočteme sadu úloh a vyhodnotíme jednak změny hodnot stavových veličin na výpočetní síti, ale i funkcionály výsledků vystihující citlivost odchylek stavových veličin na změny hodnoty Dirichletovy okrajové podmínky.

5.1 Vliv změny hodnot Dirichletovy OKP na celkové změny stavových veličin

Pro dané rozložení Dirichletovy okrajové podmínky P_D vypočteme variantně několik rozdělení $P_D + \ell \Pi_{min}$ respektive $P_D + \ell \Pi_{max}$, kde Π_{min} je zvoleno $\Pi_{min} = -4$ a $\Pi_{max} = 8$. Parametr ℓ náleží intervalu např. (-1, 1), $\ell \in (-1; 1)$. Pro nejvyšší a nejnižší hodnotu parametru zobrazíme výsledky změn jednotlivých stavových proměnných **U**, **P**. Tyto změny budou hodnoceny i v jednotlivých dílčích intervalech. Tedy označíme-li \mathbf{U}_0 , \mathbf{P}_0 . rozložení stavových veličin pro nulovou variantu a \mathbf{U}_{ℓ} , \mathbf{P}_{ℓ} , rozložení stavových veličin pro změnu hodnoty rozložení hydraulické vodivosti vyvolanou parametrem ℓ . Stavové veličiny vykreslíme pro krajní a střední hodnoty parametru ℓ a nulovou variantu. Tedy pro $\ell = -1$, $\ell = -0, 5$, $\ell = 0, 5$ a $\ell = 1, 0$. Výsledky pro minimální variantu tj. pro $\ell = -1$, pro $\ell = -0, 5$ a pro maximální variantu tj. pro $\ell = 1$ jsou znázorněny na obrázcích 32, 33 a 34 a pro piezometrickou výšku na obrázcích 36, 35 a 37.

Označme pro m-tý prvek sítě (stěny elementu pro průtoky nebo těžiště elementu pro piezometrickou výšku) následující odchylky:

$$\Delta_{\ell} U^m = |U_{\ell}^m - U_0^m|,$$

$$\Delta_{\ell} P^m = |P_{\ell}^m - P_0^m|.$$

Tyto veličiny vypočteme a vykreslíme pro jednotlivé hodnoty ℓ . Na základě grafických výsledků můžeme posoudit, ve kterých částech zkoumané oblasti mají změny Dirichletovy okrajové podmínky největší vliv. Situace je znázorněna na obrázcích 38 a 39 pro průtoky a 40 a 41 pro piezometrické výšky.

Komentář: z uvedených výsledků je zřejmé, že změny stavových veličin jsou velmi málo citlivé i na relativně značné změny Dirichletovy OKP

Dále vypočteme součet čtverců rozdílů vážený převrácenou hodnotou rozdílů vstupní změny a počtu složek stavové veličiny. Tedy vypočteme postupně

$$\Delta_{\ell} G_U(\ell) = \frac{1}{|\ell| M_U} \sqrt{\sum_{m=1}^{M_U} \frac{(U_{\ell}^m - U_0^m)^2}{(U_0^m)^2}}$$
(5.1)

$$\Delta_{\ell} G_{P}(\ell) = \frac{1}{|\ell| M_{P}} \sqrt{\sum_{m=1}^{M_{P}} \frac{(P_{\ell}^{m} - P_{0}^{m})^{2}}{(P_{0}^{m})^{2}}}$$
(5.2)

a vypočtené hodnoty sestavíme do tabulek 6 a následně vykreslíme grafy závislostí

$$\Delta_{\ell} G_U = \Delta_{\ell} G_U(\ell). \tag{5.3}$$

$$\Delta_{\ell}G_P = \Delta_{\ell}G_P(\ell). \tag{5.4}$$

postupně pro hodnoty $\ell=-1\,;\,-0,75\,;\,-0,50\,;\,-0,25\,;\,0,25\,;\,0,50\,;\,0,75\,;\,1,00\,;$ nakreslíme graf závislosti viz 42 a 43

5.2 Vliv změny hodnot Dirichletovy OKP na lokální změny stavových veličin

Nyní vyhodnotíme vliv Dirichletovy okrajové podmínky na změny toků ve vybraných oblastech. Výsledky výpočtů jsou uvedeny v tabulce 7.



Obrázek 32: Pole toků při minimální hodnotě Dirichletovy OKP



Obrázek 33: Pole toků při nulové variantě Dirichletovy OKP



Obrázek 34: Pole toků při maximální hodnotě Dirichletovy OKP



Obrázek 35: Pole tlakových výšek při minimální hodnotě Dirichletovy OKP



Obrázek 36: Pole tlakových výšek při nulové variantě Dirichletovy OKP



Obrázek 37: Pole tlakových výšek při maximální hodnotě Dirichletovy OKP



Obrázek 38: Změna pole toků při minimální hodnotě Dirichletovy OKP



Obrázek 39: Změna pole toků při maximální hodnotě Dirichletovy OKP



Obrázek 40: Změna pole tlakových výšek při minimální hodnotě Dirichletovy OKP



Obrázek 41: Změna pole tlakových výšek při maximální hodnotě Dirichletovy OKP



Obrázek 42: Závislost relativní odchylky průtoků při změně Dirichletovy OKP



Obrázek 43: Závislost relativní odchylky tlakových výšek při změně Dirichletovy OKP

$\Delta Di / G$	G(U)	G(P)
- 8 m	0,000095	0,013666
- 7 m	0,000104	0,014230
- 6 m	0,000116	0,015824
- 5 m	0,000132	0,016168
- 4 m	0,000081	0,012741
- 3 m	0,000081	0,012738
- 2 m	0,00080	0,012731
- 1 m	0,000080	0,012710
0 m	0,000	0,000
1 m	0,000081	0,012750
2 m	0,000081	0,012750
3 m	0,000081	0,012750
4 m	0,000081	0,012762
5 m	0,000081	0,012760
6 m	0,000081	0,012758
7 m	0,000081	0,012757
8 m	0,000081	0,012757

Tabulka 6: Citlivost na změnu Dirichletovy OKP

Zde byl sledován vliv změny hodnoty Dirichletovy okrajové podmínky zadávané v místě výchozů Chimú. Ostatní vstupní parametry modelu byly ponechány v souladu s "nulovou variantou". Z výsledků uvedených v tabulkách je zřejmá stabilita simulačních výsledků z rozsahu sledovaných změn od -4 do 8 m. Při změnách hodnot Dirichletovy okrajové podmínky na uvedené části sítě pod -4 m dochází potom k výrazným změnám vypočtených veličin. Vstupní změny v těchto rozsazích zásadním způsobem mění charakter tlakových poměrů, při těchto úrovních hladiny podzemních vod v místech výchozů Chimú pak přestává být tato část dominantní infiltrační oblastí, částečně se potom i mění směr toku podzemní vody. Změny pod -4 m tedy neodpovídají předpokládané koncepci modelu proudění podzemních vod v regionu a není možné je bez úpravy dalších vstupních parametrů modelu uvažovat při kalibraci uvažovat.
$\Delta Di / Misto$	Pramen	Okolí	Farrat	Chimú
		pram.		
-8	70,42	-0,02	10,40	-80,34
-7	71,06	-0,02	1,75	-90,26
-6	71,71	0,13	24,66	-99,90
-5	72,36	0,29	31,79	-109,68
-4	78,75	1,86	3,45	-106,58
-3	80,27	2,24	4,04	-113,45
-2	81,8	2,61	4,64	-120,31
-1	83,3	2,99	$5,\!23$	-127,18
0	84,8	$3,\!35$	$5,\!83$	-134,1
1	86,35	3,73	$6,\!42$	-140,97
2	87,9	4,11	7,02	-147,83
3	89,4	4,48	7,61	-154,70
4	91,2	4,86	8,21	-161,34
5	92,5	5,24	8,81	-168,40
6	94,01	$5,\!61$	9,40	-175,27
7	95,5	5,98	10,00	-182,14
8	97,07	6,36	10,60	-189,01

Tabulka 7: Vliv změny hodnoty Dirichletovy OKP na bilanci vod ve vybraných lokalitách



Obrázek 44: Graf závislosti vydatnosti pramenů výšek na změnách Dirichletových OKP

6 Vliv změny hodnot Newtonovy okrajové podmínky

Dále budeme sledovat změny výsledků při změnách zadávání Newtonovy okrajové podmínky na rozhraní aquiferu Chimú a jeho nadloží. V nulové variantě je na této části hranice zadána homogenní Neumannova okrajová podmínka. Z výpočtených hodnot nulové varianty dostaneme hodnoty tlakové výšky na této části hranice. Tyto vypočtené hodnoty navýšíme o 1 metr a takto dostaneme rozložení vnější tlakové výšky P_T , kterou použijeme k definování nové okrajové podmínky Newtonova typu. Tedy na této části hranice zadáme následující podmínku

$$U = \sigma(P - P_T),$$

kde $P_T = P_0 + 1$ a P_0 jsou vypočtené hodnoty tlakové výšky nulové varianty na horních okrajových stěnách aquiferu Chimú. Hodnoty přestupového koeficientu σ budeme volit v intervalu $(10^{-4}; 10^{-1})$, tedy $\sigma \in (0,0001; 0, 1)$. Konkrétně budeme volit hodnoty $\sigma = 0,0001$; $\sigma = 0,001$; $\sigma = 0,01$; $\sigma = 0,1$. Všechna ostatní vstupní data úlohy zůstanou shodná se zadáním nulové varianty. Budeme měnit pouze hodnotu Newtonovy okrajové podmínky. Pro tento typ změn vypočteme sadu úloh a vyhodnotíme jednak změny hodnot stavových veličin na výpočetní síti, ale i funkcionály výsledků vystihující citlivost odchylek stavových veličin na změny Newtonovy okrajové podmínky.

Tedy označíme-li \mathbf{U}_0 , \mathbf{P}_0 . rozložení stavových veličin pro nulovou variantu a \mathbf{U}_{σ} , \mathbf{P}_{σ} , rozložení stavových veličin pro změnu hodnoty Newtonovy okrajové podmínky zadané koeficientem přestupu σ .

6.1 Vliv změny hodnot Newtonovy okrajové podmínky na celkové změny stavových veličin

Stavové veličiny vykreslíme pro zvolené hodnoty parametru σ a nulovou variantu. Tedy pro $\sigma = 0,0001$; $\sigma = 0,001$; $\sigma = 0,01$ a $\sigma = 0,1$. Výsledky pro jednotlivé varianty jsou znázorněny na obrázcích 45 a 46 a pro piezometrickou výšku na obrázcích 47 a 48.

Označme pro m-tý prvek sítě (stěny elementu pro průtoky nebo těžiště elementu pro piezometrickou výšku) následující odchylky:

$$\Delta_{\sigma} U^m = |U_{\sigma}^m - U_0^m|,$$

$$\Delta_{\sigma} P^m = |P_{\sigma}^m - P_0^m|.$$



Obrázek 45: Toky při minimální změně Newtonovy OKP ve srovnání s nulovou variantou



Obrázek 46: Toky při maximální změně Newtonovy OKP ve srovnání s nulovou variantou



Obrázek 47: Tlakové výšky a lokální toky při minimální změně Newtonovy OKP ve srovnání s nulovou variantou



Obrázek 48: Tlakové výšky a lokální toky při maximální změně Newtonovy OKP ve srovnání s nulovou variantou

Tyto veličiny vypočteme a vykreslíme pro jednotlivé hodnoty σ . Na základě grafických výsledků můžeme posoudit, ve kterých částech zkoumané oblasti mají změny Newtonovy okrajové podmínky největší vliv.

Výsledky změn stavových veličin pro minimální variantu tj. pro $\sigma = 0,00001$ a pro maximální variantu tj. pro $\sigma = 0, 1$ jsou znázorněny na obrázcích 49 a 50 pro průtoky a pro piezometrické výšky.

Dále vypočteme součet čtverců rozdílů vážený převrácenou hodnotou rozdílů vstupní změny a počtu složek stavové veličiny. Tedy vypočteme postupně

$$\Delta_{\sigma}G_{U}(\sigma) = \frac{1}{M_{U}} \sqrt{\sum_{m=1}^{M_{U}} \frac{(U_{\sigma}^{m} - U_{0}^{m})^{2}}{(U_{0}^{m})^{2}}}$$
(6.1)

$$\Delta_{\sigma}G_{P}(\sigma) = \frac{1}{M_{P}} \sqrt{\sum_{m=1}^{M_{P}} \frac{(P_{\sigma}^{m} - P_{0}^{m})^{2}}{(P_{0}^{m})^{2}}}$$
(6.2)

a vypočtené hodnoty sestavíme do tabulky 8.

σ / G	G(U)	G(P)
0,0001	12,221	1,079
0,001	14,943	1,037
0,01	23,298	0,993
0,1	26,792	0,978

Tabulka 8: Citlivost na změnu Nw OKP

$$\Delta_{\sigma}G_U = \Delta_{\sigma}G_U(\sigma). \tag{6.3}$$

$$\Delta_{\sigma}G_P = \Delta_{\ell}G_P(\sigma). \tag{6.4}$$

postupně pro hodnoty $\sigma=10^{-4}\,,\sigma=10^{-3}\,,\sigma=10^{-2}\,$ a $\sigma=10^{-1}$ nakreslíme graf závislosti viz obr. 51 a 52.

6.2 Vliv změny hodnot Newtonovy okrajové podmínky na lokální změny stavových veličin

Pokud studujeme změny toku v jednotlivých částech sítě při změnách parametru σ Newtonovy okrajové podmínky zadávané na horním okraji vrstvy Chimú dostaneme hodnoty, které jsou uvedeny v tabulce 9. V grafické podobě byla



Obrázek 49: Změna tlakových výšek a lokálních toků při minimální změně Newtonovy OKP ve srovnání s nulovou variantou



Obrázek 50: Změna tlakových výšek a lokálních toků při maximální změně Newtonovy OKP ve srovnání s nulovou variantou



Obrázek 51: Graf závislosti funkce G(U) při změně Newtonovy OKP



Obrázek 52: Graf závislosti funkce G(P) při změně Newtonovy OKP

σ / Místo	Pramen	Okolí	Farrat	Chimú
		pram.		
0,0001	87,487	4,009	77,937	7,366
0,001	89,161	4,421	8,837	295,123
0,01	89,440	4,489	9,150	746,903
0,1	89,525	4,510	9,189	1019,26

6. VLIV ZMĚNY HODNOT NEWTONOVY OKRAJOVÉ PODMÍNKY

Tabulka 9: Vliv změny koeficientu přestupu na horním povrchu Chimú na bilanci vod ve vybraných oblastech



Obrázek 53: Graf závislosti průtoku pramenů na změně koeficientu přestupu Newtonovy OKP

potom zpracována pouze závislost vydatnosti pramenů při sledované variaci vstupních parametrů, výsledný graf je uveden na obrázku 53.

V této části byla studována závislost implementovaného modelu na změně koeficientu přestupu Newtonovy okrajové podmínky. Variace tohoto parametru byla prováděna pro horní okraj vrstvy formace Chimú. V "nulové variantě" byla na této části hranice zadána homogenní Neumannova okrajová podmínka, vyjadřující praktickou nevodivost nadložních vrstev v souladu s koncepcí modelu stanovenou hydrogeologem. Uvažovaná nepropustnot je limitním případem pro řádově nízkou vodivost těchto vrstev ve srovnání s horninou formace Chimú. Vzhledem k tomu, že vodivost uvažované horniny je velmi nízká nikoli však nulová je možně jistý přetok přes tuto část hranice do modelované oblasti předpokládat. Tento předpoklad potom vyjadřujeme Newtonovou okrajovou podmínkou, která má dva parametry – hodnotu tlaku (za příslušnou částí hranice) a hodnotu přestupního koeficientu. Výsledky uvedené v této kapitole byly získány pro tlakový parametr Newtonovy okrajové podmínky odpovídající přetlaku 1 m (tlakové výšky) s variací přestupního koeficientu v rozsahu od 10⁻⁴ do 10⁻¹. Z uvedených výsledků je partný vliv sledované změny na tok oblastí. Při vyšším koeficientu přestupu dochází ke zvýšení toku, závislost vykazuje nasycení a výrazně sníženou citlivost na další navyšování při hodnotách koeficientu přestupu σ od 10⁻³. Obdobné nasycení vykazuje i funkce G(U) v tomto případě při hodnotách koeficientu přestupu σ vyšších než 10⁻². Všechny uvedené hodnoty koeficientů přestupu jsou v jednotkách konzistentních s jednotkami zadávaných hydraulických vodivostí, tedy v 10⁻⁵ m/s.

Závěr

Cílem modelování bylo zpracování metodiky přípravy sítě pro vymezenou oblast s uvážením specifických požadavků simulované reality, vývoj metodiky přípravy vstupních dat pro naplnění modelu a implementace prvních variant modelů hydrogeologických situací v hlavním aquiferu modelované oblasti. Za účelem naplnění stanovených cílů bylo postupně provedeno:

- rozbor modelované problematiky
- výběr modelované oblasti, studium výsledků geologů a hydrogeologů
- byla připravena metodika generovaní sítě pro danou oblast,
- byla připravena metodika generování vstupních dat modelu,
- byla realizována první varianta modelu vymezené oblasti.
- bylo provedeno hodnocení numerické citlivosti zvolených variant modelů na změny vstupních podmínek,
- byla zpracována metodika postupu při kalibraci hydrogeologických modelů v oblastech se základním povrchovým geologickým průzkumem.

Při realizaci modelu byly využity výsledky předchozích prácí geologů, hydrogeologů, matematiků a informatiků-programátorů. I přes tato poskytnutá data se skupina zabývající se modelováním musela potýkat s řadou nejistot a při realizaci první varianty modelu bylo třeba vzít v úvahu velkou řadu zjednodušení, abychom dosáhli výsledků odpovídajících představám o skutečném proudění podzemních vod v modelované oblasti. Nutno podotknout, že vývoj konkrétního modelu je práce velmi specifická, je třeba vzít v úvahu řadu skutečností významných pro danou konkrétní modelovanou lokalitu. Teprve po jisté době testování modelu, zjišťování citlivosti výsledků na změnu vstupních dat a podobně, lze přikročit ke kvalifikovanému zhodnocení celého modelu. Z časových důvodů byla aktuálně realizována pouze první varianta modelu, jejíž výsledky jsou v této zprávě prezentovány. Prezentovaný model byl realizován s četnými zjednodušeními a nelze jej v této fázi považovat za zcela definitivní. V případě dalšího zájmu o výsledky modelování v rámci tohoto projektu bude postupně provedeno jeho zpřesnění, bude zpracována citlivostní analýza a vypracována řada variantních scénářů vývoje hydrogeologické situace.

Přínos práce

Disertační práce zpracovává řadu variant úlohy proudění podzemní vody ve velmi komplikovaném horninovém prostředí. Tímto práce přispívá k rozsáhlému testování vyvíjeného modelu a ukazuje jeho možnosti při řešení úloh regionálního významu. Porovnání výsledků zadaných úloh ukazuje očekávané chování modelu při variaci vstupních dat. Výsledky byly v práci dále integrovány do definovaných funkcionálů a ty pak porovnány formou tabulek a hodnoceny graficky. Výsledky ukazují vysokou stabilitu výpočtu v poměrně značném rozsahu zadávaných dat. Dále grafy prokazují i přechodové charakteristiky při změnách parametrů úlohy a vyjadřují schopnost nasycení sledované suboblasti, na které jsou měněny vstupní data. Z grafických výsledků je možné usoudit na žádané změny vstupních parametrů, které zajistí větší soulad vypočtených a sledovaných dat.

Navazující a budoucí práce

V budoucnu bude vhodné rozšíření modelu o další fyzikální vlivy, jako je napříkad vliv tepelného pole, tektonických poruch v podloží a podobně. Po té bude možné testování dalších změn. Například změn okrajových podmínek na těch částech hranice, kde byla zatím zadávána homogenní Neumannova podmínka. Nebo vliv geometrie a mocnosti aquiferu na výsledné toky.

V každém případě budou současné zkušenosti využity i v jiných oblastech, ve kterých je velmi málo vstupních dat a současně jsou požadovány komplexní výsledky. Například budou zkušenosti využity při návrhu koncepce a vlastní stavbě a ověřování modelu chování hlubinného úložiště jaderného odpadu v krystaliniku.

Reference

- KRÁLOVCOVÁ J., MARYŠKA J., SEVERÝN O., ŠEMBERA J.: Formulation of mixed-hybrid FE model of flow in fractured porous medium. Numerical Mathematics and Advanced Application, Proceedings of ENUMATH 2005, Springer-Verlag, 2006, pp. 1184-1191. ISBN 3-540-34287-7.
- [2] SEVERÝN O., MARYŠKA J., KRÁLOVCOVÁ J., HOKR M.: Modeling of groundwater flow and contaminant transport in hard rock using multidimensional FEM/FVM. Proceedings of GeoProc 2006, Nanjing, 2006.
- [3] SEVERÝN O., MARYŠKA J., KRÁLOVCOVÁ J., HOKR M.: Numerical simulation of borehole tests in fractured rock at Potůčky site. Proceedings of 4th Workshop on hard rock hydrogeology of the Bohemian Massif, Jugowice, 2006.
- [4] SEVERÝN O., MARYŠKA J., KRÁLOVCOVÁ J., ŠEMBERA J.: A novel approach to modelling of flow in fractured porous medium. Kybernetika, vol 40. (2004), number 1.
- [5] MARYŠKA J., KRÁLOVCOVÁ J., CÍSAŘOVÁ K. A KOL: Výsledky matematického modelování pohybu fluid v puklinovém prostředí testovací lokality. Závěrečná zpráva projektu: Provedení geologických a dalších prací na testovací lokalitě Melechovský masiv 2. etapa. 2006. Stran 52. (Oponovaná zpráva, projekt SURAO, Melechov)
- [6] MARYŠKA J. A KOL:: Matematické modelování. Závěrečná zpráva Programu státní podpory výzkumu a vývoje MŽP VaV/660/2/03 za roky 2003-5. 2006. Stran 62. (Oponovaná zpráva)
- [7] MARYŠKA J., KRÁLOVCOVÁ J., CÍSAŘOVÁ K., CAPEKOVÁ Z.: Modelování hydrogeologických situací v oblasti Cajamarca, oponovaná zpráva projektu, 2006, stran 21.
- [8] MARYŠKA J. A KOL: Výzkumná zpráva výzkumného centra Pokročilé sanační technologie a procesy. 2006.(Oponovaná zpráva)
- [9] CÍSAŘOVÁ K., KRÁLOVCOVÁ J., MARYŠKA J.: Models of hydro geological processes. ECMS 2007, 8th International workshop on Electronics, Control, Modeling, Measurement and Signals 2007 (Připravené do tisku).
- [10] CÍSAŘOVÁ K., CAPEKOVÁ Z.: The Experience with a Three- Dimensional Finite Element Mesh Generátor. Proceedings of SIMONA 2006, Technická univerzita v Liberci, 2006, ISBN 80-7372-152-X

[11] ŠÍMA J. A KOL.: Desarrollo de las aguas termales en el Peru. Průběžná zpráva projektu: Rozvoj, využití podzemních, zvláště termálních a mineralních vod v Peru. (Oponovaná zpráva Lima 2006, společný projekt Viceministerio de Turismo Peru a Ministerstva životního prostředí ČR)