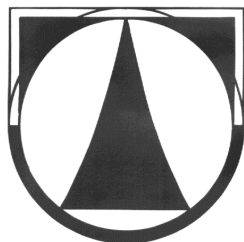


Technická univerzita Liberec

Hájkova 6, Liberec

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských
studií



Diplomová práce

Vyhodnocení shody výsledků
sanačního modelu s reálným provozem

Evaluation of compliance of remediation
model results with real operation

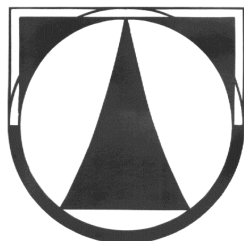
Liberec 2003

David Alimov

Technická univerzita Liberec

Hálkova 6, Liberec

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských
studií



Diplomová práce

Vyhodnocení shody výsledků
sanačního modelu s reálným provozem

Evaluation of compliance of remediation
model results with real operation

DAVID ALIMOV

Vedoucí diplomové práce: [RNDr. Jan Novák, Ph.D.](#)

Konzultant: [Ing. Jiří Mužák, Ph.D.](#)

Rozsah práce: XXX stran

Počet obrázků: XX

Počet příloh:

Liberec

2003

Anotace

Cílem diplomové práce je vytvoření nových modulů pro matematický model proudění a transportu látek ve strážském bloku. Výsledná úloha se skládá ze dvou základních částí: programu pro sestaví okrajových podmínek a úpravu řídicího souboru a programu pro porovnání reálných a modelových dat.

Hlavním přínosem je vytvoření systému na sestavení okrajových podmínek z reálných dat, jež jsou použity jako vstup pro měsíční kalibrační výpočet a k odhadu počátečních podmínek.

Anotation

The aim of the diploma thesis is to create new moduls for a mathematical model of flow and transport of substances in Stráž area. The resulting case is composed from two basic parts: program for composition of boundary contitions and for editing a controll file. And program for comparison of real and model data.

The main contribution is to creation of the system for preparation of boundary conditions from real data, whitch are used for a monthly calibration calculation and for an estimation of the initial conditions.

Prohlášení:

Byl jsem seznámen s tím, že na mou diplomovou práci se vztahuje zákon č. 121/2000 o právu autorském, zejména § 60 (školní dílo).

Beru na vědomí, že TUL má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé DP a prohlašuji, že souhlasím s případným užitím mé diplomové práce (prodej, zapůjčení apod.).

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně, za odborného vedení vedoucího diplomové práce Jana Nováka a konzultantů zastupujících DIAMO s.p. Stráž pod Ralskem.

Veškeré podklady, ze kterých jsem čerpal, jsou uvedeny v seznamu literatury na straně [34](#).

V Liberci 22. května 2003

.....
David Alimov

Poděkování:

Rád bych touto cestou poděkoval Janu Novákovi za jeho cenné připomínky, trpělivost a ochotu při vedení diplomové práce. Rovněž bych chtěl poděkovat Ladislavovi Kastlovi a Pavlovi Kolářovi, kteří mi vyšli maximálně vstříc a umožnili mi přístup ke všem potřebným informacím. Velký dík patří Donaldu E. Knuthovi za jeho systém \TeX pro precizní sazbu, který věnoval zdarma celému světu. A všem, kteří se podílejí na vývoji Linuxu a \LaTeX u, jež mi poskytli vynikající prostředí pro tuto práci. Nezapomenutelný dík patří Ing. Rudolfovi Matouškovi, za zapůjčení počítače a velkou oporu při studiu. V neposlední řadě patří dík mé celé rodině a přátelům, kteří mi byli oporou během celé práce.

Zkratky

Zkratka	Termín
TDS	„ T otal D isslorved S olids“ – celkové rozpuštěné látky.
MT	„ M embránová T echnologie“ – zařízení, které slouží k zahuštění slabších roztoků před vstupem do odparky.
NDS	„ N eutralizační D ekontaminační S tanice“ – slouží pro neutralizaci méně koncentrovaných roztoků.
ML1	„ M ateční L ouh“ – je zbytek roztoku po krystalizaci kamence ze SLKR1.
ML2	„ M ateční L ouh“ – zbylý roztok po dodatečné krystalizaci kamence v rámci SLKR2.
SLKR1	„ S tanice L ikvidace K yselých R oztoků“ – první část, zajišťuje odpaření a krystalizaci kamence.
SLKR2	„ S tanice L ikvidace K yselých R oztoků“ – druhá část, zajišťuje přepracování kamence na hospodářsky využitelné produkty. Včetně přípravy odpadu k bezpečnému uložení.

Obsah

Zkratky	V
1 Úvod	1
1.1 Seznámení s problematikou	1
1.2 Sanace cenomanské zvodně	4
2 Modelový systém	8
2.1 Modely v DIAMO s.p.	9
2.2 Pojmy v systému	11
2.2.1 Pojmy numerického modelu	11
2.2.2 Pojmy chemické těžby	13
3 Analýza problému	14
3.1 Algoritmizace problému	15
4 Řešení úlohy	17
4.1 Výchozí pozice	17
4.2 Metodika řešení	17
4.2.1 Hlavičkový soubor b_head.h	18
4.2.2 Sestavení OKP	18
4.2.3 Porovnání	22
4.3 Výsledky	23
5 Ukázka algoritmů	28
5.1 Nalezení elementu v oblasti	28
5.2 Nalezení vrstev (elementu) v multielementu	30
6 Závěry	32
Literatura	34
A Grafické výsledky	35

Seznam obrázků

1.1	Uranové ložisko Stráž a vyluhovací pole	2
1.2	Schématický řez strážským blokem	3
1.3	Princip vtláčení a čerpání	5
1.4	Schéma zpracování kontaminantů	6
2.1	Ložisko Stráž s modelovou sítí a vyluhovacími poli	10
2.2	Vysvětlení pojmů v multielementu	12
4.1	Stručný vývojový diagram pro přípravu dat	19
4.2	Stručný vývojový diagram pro přípravu dat	22
4.3	Statistické výpočty sledovaných koncentrací za rok 1999	25
4.4	Mapa modelových koncentrací SO ₄ sledované oblasti	26
4.5	Mapa rozdílů koncentrací SO ₄ sledované oblasti	26
4.6	Koncentrace SO ₄ vrtu VP12B3471	27
5.1	Ukázková síť s vrtem a oblastí DX a DY	29
A.1	Koncentrace SO ₄ vrtu VP12B3471	36
A.2	Koncentrace NH ₄ vrtu VP12B3471	37
A.3	Mapa modelových koncentrací SO ₄ sledované oblasti	38
A.4	Mapa reálných koncentrací SO ₄ sledované oblasti	39
A.5	Mapa rozdílů koncentrací SO ₄ sledované oblasti	40
A.6	Mapa modelových koncentrací NH ₄ sledované oblasti	41
A.7	Mapa reálných koncentrací NH ₄ sledované oblasti	42
A.8	Mapa rozdílových koncentrací NH ₄ sledované oblasti	43

Kapitola 1

Úvod

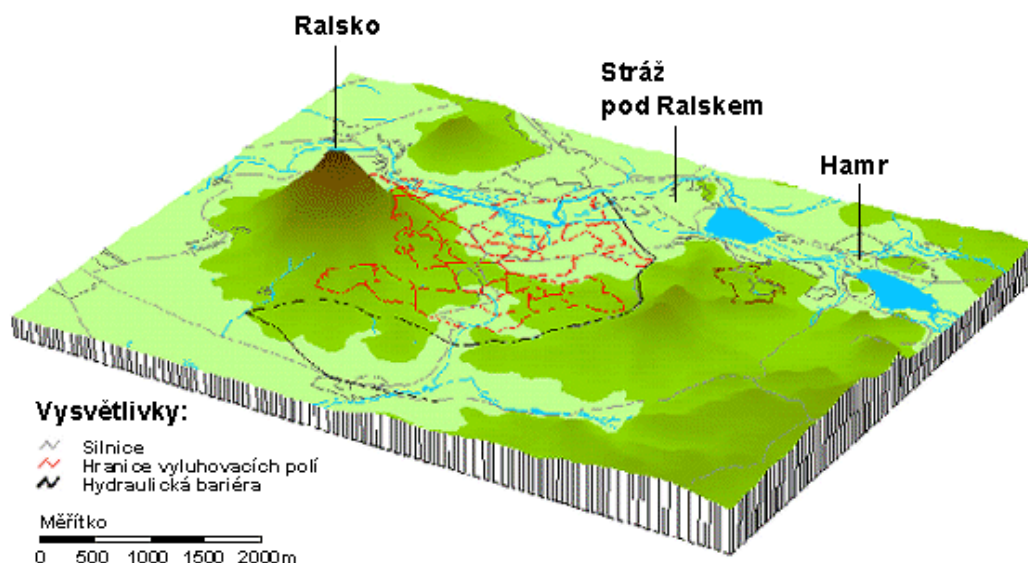
„V dnešní době se stává modelování součástí každodenního života většiny z nás. Setkáváme se s ním skoro denně, ať už ve formě předpovědi počasí, finančních prognóz či při prezentaci nového modelu automobilu,“ takto charakterizovali autoři v [7] nástup modelování. Možnost velkých výkonů počítačů přinesla uplatnění metody konečných prvků na úlohy, jež se na starších počítačích nedaly numericky řešit. Dnes již jsou k dispozici velice výkonné nástroje, které umožňují řešení velmi složitých procesů probíhajících v horninovém prostředí. Praktické využití je velmi rozmanité. Matematické modelování se uplatňuje při řešení celé řady konkrétních úloh. Modely mají různé velikosti. Od mikromodelů (model lineární pružiny) přes globální modely proudění a transportu látek až po kosmické modelování. S tím samozřejmě souvisí i způsob matematické formulace úloh, detailnost řešení i volba numerických metod. Přístupů a možných řešení je velké množství, a jsou schopny pokrýt širokou řadu modelovaných dějů.

1.1 Seznámení s problematikou

Uranové ložisko Stráž se nachází v severozápadních Čechách. Jeho severozápadní hranice je tvořena Strážským zlomem, na jihu a západě umělou hranicí obcí Stráž pod Ralskem, kótou Stohánek, osadou Svěbořice, Pavlín a Noviny pod Ralskem. Území ložiska je tvořeno mořskými a kontinentálními křídovými sedimenty, které jsou významně porušeny vulkanickými pochody. Plocha se vyznačuje značným množstvím zlomů s komplikovanými puklinami.

V místě těžby jsou vyvinuty dva zvodněné kolektory, oddělené poloizolační vrstvou spodního turonu. Ve spodní cenomanské vrstvě se nacházejí uranová ložiska a cenomanské vody nebyly nikdy vodohospodářsky využity

pro přirozený vysoký obsah radioaktivních znečišťujících látek. Naopak vody svrchního turonského kolektoru představují jeden z nejvýznamnějších zdrojů pitné vody v ČR a jsou vodohospodářsky využívány. Strážský blok jako součást severočeské křídly je stanoven vládou za chráněnou oblast s přirozenou akumulací vod.



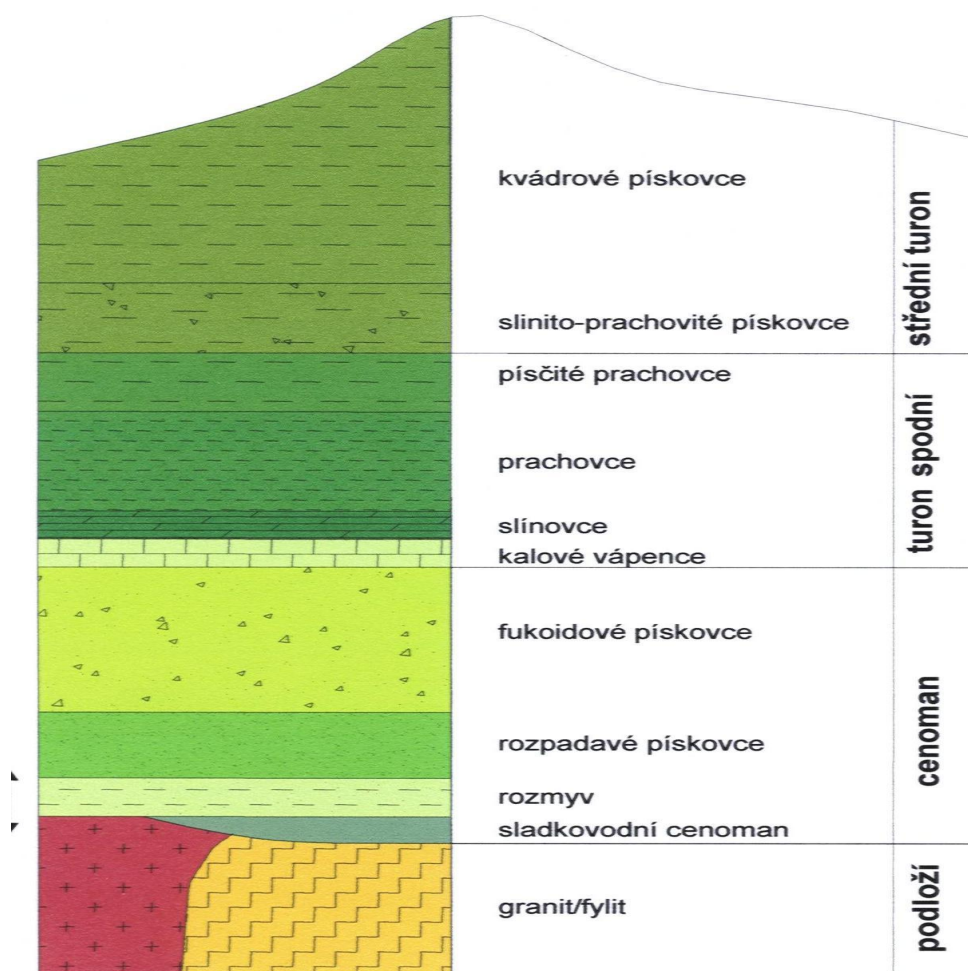
Obrázek 1.1: Uranové ložisko Stráž a vyluhovací pole

Ve strážsko-hamerské oblasti se v roce 1968 začaly souběžně rozvíjet dvě dobývací metody. Klasická hlubinná (hornická) těžba a metoda podzemního loužení. Za loužící činidlo byl vybrán zředěný roztok kyseliny sírové. Každá z těchto metod vyžadovala pro svoji existenci jiné podmínky. Hlubinná těžba dokonalé osušení ložiska, metoda podzemního loužení prakticky nezměněné hydrogeologické poměry na ložisku. Rozsáhlé odvodňování cenomanského zvodněného kolektoru pro potřeby hlubinného dolu Hamr 1 začalo v roce 1967. Souběžně s počátkem hornické těžby uranových rud byly zahájeny i první provozní pokusy s podzemním loužením.

V polovině 70. let se prokázalo, že současná existence dvou navzájem se negativně ovlivňujících těžebních metod povede k neúměrnému a stále se zvětšujícímu zatěžování životního prostředí v oblasti podzemních vod. V důsledku opoždění výstavby a náběhu hydraulické bariéry došlo k průniku kyselých vod z chemické těžby do důlního pole DH 1. Nutnost ochrany důlního pole před účinky kyselých roztoků si v polovině 80. let vyžádala vybudování systému předstunuté drenáže a výstavbu neutralizačních stanic pro likvidaci kyselých důlních vod. V současné době je v hlubinném dole Hamr

již ukončena těžba uranové rudy a důl je od roku 2001 zatápen. Chemická těžba uranu je v likvidaci od roku 1996.

V průběhu těžby se ukázalo, že původní předpoklady o minimálním dopadu na životní prostředí byly mylné. Podcenění podmínek geologické stavby oblasti (zlomy, pukliny, projevy vulkanizmu a tektoniky) se projevilo zvýšením rizika ohrožení životního prostředí. Bylo nutno při loužení použít větší dávky kyseliny sírové, než je světový standard pro kyselé loužení, což vedlo k rozptýlu technologických roztoků mimo areál chemické těžby. Za dobu chemické těžby uranu bylo do podzemí vtlačeno téměř 5 mil. tun kyseliny sírové a dalších chemikálií. Jejich převážná část (cca 99,5 %) se nachází v cenomanské zvodni, kde je kontaminováno 186 mil. m³ vod na ploše cca 24 km².



Obrázek 1.2: Schématický řez strážským blokem

V současnosti je proudění podzemních vod v cenomanském kolektoru omezeno činností odparky provozované ve stanici likvidace kyselých roztoků tak, že nedochází k dalšímu rozptýlu kontaminantů a výtlačná úroveň cenomanské zvodně je udržována pod úrovní hladiny zvodně turonské. Po ukončení aktivních zásahů na ložisku nastoupá tlak v cenomanské zvodni na původní hodnoty a již v západní části kontaminované plochy převýší tlak turonu a vytvoří předpoklad pro přetok kontaminovaných cenomanských vod do turonského kolektoru. Byl proveden rozsáhlý geologický i hydrogeologický průzkum, který lokalizoval nejméně dvě rizikové oblasti s možností přestupu cenomanských vod do turonských. Některé kolektorové přetoky mohou být ještě podporovány oslabením izolační schopnosti vrstvy spodního turonu vlivem existence cca 10 tisíc vrtů.

Bez sanace horninového prostředí by docházelo za 50 let k ohrožení zásob pitných vod a k dalšímu šíření znečišťujících látek bez možnosti efektivního sanačního zásahu. Je nutné ji dovést na takovou úroveň, aby nedocházelo k dalšímu ohrožování. Rizika spojená s touto oblastí, mohou mít za následky i prosáknutí kontaminace z cenomanské zvodně až do řeky Labe. Prosáknutí do Labe je velice dlouhodobá záležitost, ale je ji třeba vyzvednout z hlediska ekologie. Aktivní sanační zásah spočívá ve vyvedení kontaminantů z podzemí a jejich následném přepracování či ekologickém uložení na povrchu, v likvidaci vrtů a v revitalizaci krajiny.

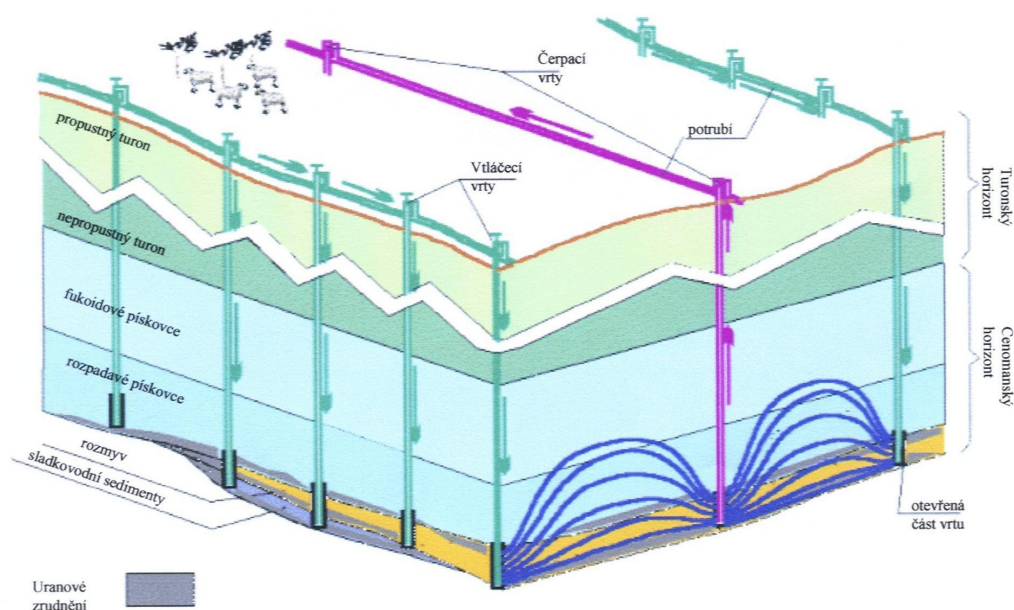
1.2 Sanace cenomanské zvodně

V období let 1996 až 1999 probíhalo na ložisku Stráž přípravné období sanace, jehož cílem byla horizontální a vertikální stabilizace kontaminantů v cenomanské zvodni a příprava vyvádění znečišťujících látek z této zvodně.

Likvidace chemické těžby zahrnuje:

- uvedení horninového prostředí (cenomanské i turonské zvodně) do stavu, který zaručí zachování využitelnosti turonských vod severočeské křídy jako zásobárny pitné vody,
- provedení likvidace vrtů a povrchových objektů a zařízení,
- revitalizaci krajiny a začlenění povrchu vyluhovacích polí do ekosystémů s respektováním územních systémů ekologické stability a územních plánů,
- řízení likvidace chemické těžby.

Rozhodující pro průběh sanačních prací bylo zprovoznění technologií SLKR1 v červnu 1996. Postupně byly zprovozněny tři odpařovací kolony, zrealizovány jejich garanční a výkonnostní zkoušky a celý komplex byl schválen do trvalého provozu. Do povrchového toku Ploučnice byl během přípravného období sanace již vypouštěn destilát, produkovaný odpařovací stanicí. Koncentrát z odparek byl vtlačěn zpět do cenomanu.

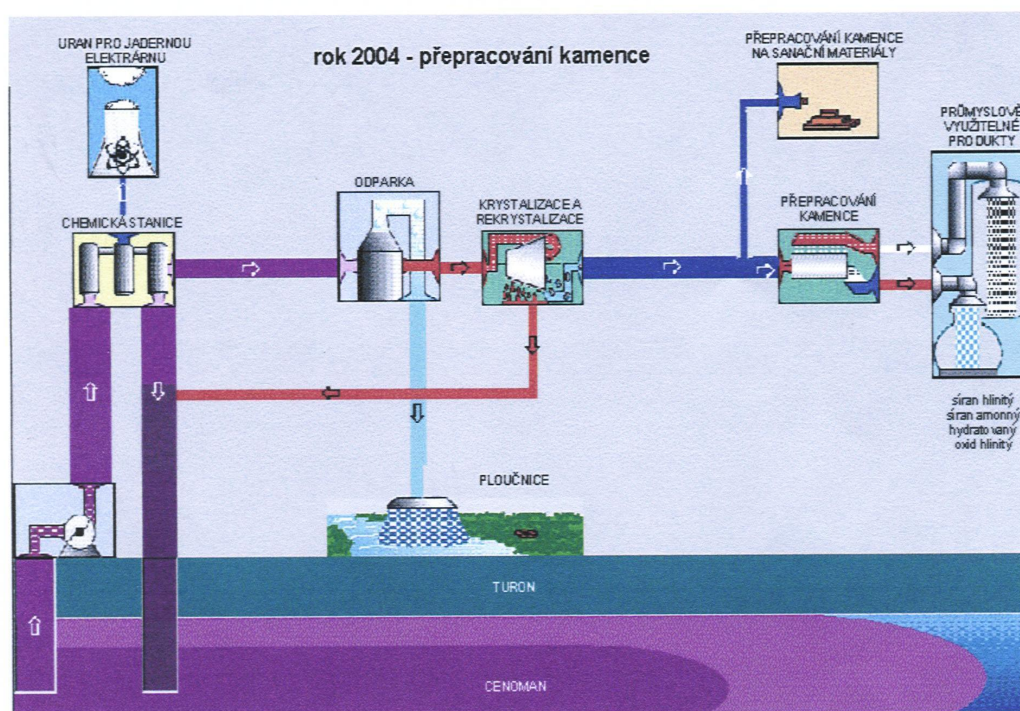


Obrázek 1.3: Princip vtláčení a čerpání

Vytvořením podbílance cenomanských roztoků v ploše vyluhovacích polí bylo stabilizováno proudění podzemních vod a současně byl navozen přetlak turonské zvodně na zvodně cenomanskou v celé rizikové ploše. Z čerpaných roztoků byly průběžně stále sorbovány uranové sloučeniny, které byly následně upraveny na odbytovatelný diuranát amonný. Byla ukončena dotace kyseliny sírové do vtláčených roztoků a výrazně omezeno používání kyseliny fluorovodíkové k čištění vrtů. Štíhlé liftové čerpací vrtky jsou pro potřeby sanace postupně nahrazovány širokoprofilovými čerpadlovými vrtky.

Cílem sanace cenomanské zvodně je postupné snížení množství kontaminantů v této zvodni až na požadovanou úroveň, při které již nebude ohrožena kvalita turonských pitných vod. Intenzita možného vyvádění cenomanské kontaminace je vedle možností odparky limitována kapacitou navazujících zpracovatelských technologií pro přepracování vyprodukovaného kamence. V letech 2000 až 2002 bylo z cenomanské zvodně vyvedeno prvních několik tisíc tun krystalického kamence amonohlinitého. Na produkci kamence ze

SLKR1 v současné době navazuje jeho zpracování v technologickém zařízení na výrobu síranu hlinitého, který je vhodnou surovinou pro vodohospodářské účely. Druhým produktem zpracovatelské linky je roztok síranu amonného, který je využíván při úpravě poměru $\text{NH}_4^+ : \text{Al}$ v krystalizaci kamence.



Obrázek 1.4: Schéma zpracování kontaminantů

Základním principem sanace je odčerpávání kontaminovaných roztoků a jejich odsolování na povrchu. Vyčištěnou vodu je možno vypouštět do vodoteče. Zakoncentrované kontaminanty budou zpočátku zčásti vtlačeny zpět do cenomanské zvodně a později budou zpracovávány v technologiích SLKR2. Získané produkty závěrečného zpracování budou jako materiály z hornické činnosti odbytovány k následnému průmyslovému využití nebo budou ekologicky uloženy na odkalištích.

S časovým odstupem bude realizována technologie zpracování matečných louhů ML1, které zbývají po krystalizaci kamence z koncentráту odparky. Toto zpracování bude spočívat v tepelném zahuštění a oddělení dalšího podílu solí ve formě kamence. Zbytkový matečný louh ML2 bude vtlačen zpět do podzemí. Bude tak zajištěno vyvážení cca 75 % solí vstupujících do SLKR1.

Zpětné vtlačení částí solí do ložiska je možné pouze v určitém časovém období. Proto bude dále navazovat výstavba technologie plného zpracování matečných louhů a zpětné vtlačení solí bude následně ukončeno.

Souběžně bude pro čištění roztoků z okrajových částí ložiska s celkovou solností okolo 10 g/l využita ověřená technologie neutralizačních stanic (NDS). Takto získané mírně alkalické roztoky budou vtlačeny zpět do podzemí vrty na hranicích ložiska, čímž budou v předstihu vytvářeny příznivé podmínky pro závěrečnou imobilizaci kontaminantů v podzemí.

V pozdějších letech bude koncentrace čerpaných roztoků klesat a pro využití plné kapacity SLKR1 bude nutno zahustit roztoky před vstupem na odparku na membránových jednotkách (MT). To umožní zvýšit objem čerpaných roztoků a sanace se tak zrychlí. Diluát bude vtlačen zpět do cenomanského horizontu. Při vhodném uspořádání bude tato voda vytěsňovat kontaminované roztoky z těžko přístupných partií.

V závěrečných fázích sanace může být využita imobilizace kontaminantů v podzemí. Imobilizaci je nutno, s ohledem na její technickou náročnost, experimentálně ověřit. Pokud se prokáže možnost vtlačení vápenné suspenze, jejího dostatečného rozptýlení v podzemí a průběhu srážecích reakcí ve velkém objemu pórového prostoru horniny, bude provedena optimalizace postupu sanace.

Vzhledem k časové, technické a ekonomické náročnosti sanace je celý proces rozdělen do pěti na sebe navazujících etap. Tento postup umožní verifikovat jednotlivé kroky a korigovat postup v každé následující etapě tak, aby bylo dosaženo ekologického a ekonomického optima.

Abychom mohli spustit kalibrační proces, musíme mít zdrojová data. A právě přípravou dat a porovnáním reálných a modelových dat se zabývá můj program popsáný níže. Pro úvodní část jsem použil literaturu uvedenou v [2], [3] a [4] .

Kapitola 2

Modelový systém v DIAMU

Likvidace chemické těžby uranu je dlouhodobým, složitým procesem, který je nutno průběžně vyhodnocovat a upřesňovat. Za tímto účelem byly realizovány rozsáhlé monitorovací, ověřovací a modelovací práce.

Rozdělení sanace do pěti na sebe navazujících etap má přímou vazbu na matematické modely, jež predikují optimální výběr strategií, technologií a řešení alternativních postupů.

Pro řešení problematiky sanace horninového prostředí byl vytvořen systém matematických modelů pro simulaci procesů v podzemí. Tyto modely řeší problematiku proudění podzemních vod, transportu látek, chemických změn v roztocích i v kontaminovaných horninách, sorpční děje apod.

Monitoring životního prostředí a především monitoring horninového prostředí je rozhodující činností pro vyhodnocování účinnosti sanačních zásahů a pro jejich korekturu. Monitorování bude probíhat po celou dobu likvidace chemické těžby a jeho komplexní vyhodnocení bude zpracováváno jedenkrát ročně.

Cílem matematického modelování je jednak upřesňování cílových parametrů, jednak optimalizace postupu sanace obou zvodní. Modely jsou kalibrovány podle nově zjišťovaných hydrogeologických údajů, laboratorních testů, výsledků ověřovacích prací a zejména podle výsledků monitoringu a činnosti povrchových technologických zařízení. Současně probíhá upřesňování podle nových poznatků z vývojových a ověřovacích prací. Ekonomická část je pravidelně aktualizována podle účetních uzávěrek, vývoje cen, předpisů, výše dotací apod. Limit obsahu zbytkové cenomanské kontaminace 8 g/l TDS byl stanoven jako předběžný cílový parametr sanace. Cílový parametr sanace pro oba kolektory musí být stanoven v rámci II. etapy sanace, tzn. do roku 2010.

Ověřovací práce slouží k potvrzení nebo vyvrácení teoretických předpokladů, případně k stanovení podmínek, za nichž teoretické předpoklady platí.

Jedná se zejména o provozní a poloprovozní experimenty, kontrolní jádrové vrty, hydrogeologické zkoušky, rozsáhlé laboratorní práce apod.

Cílové parametry sanace obou kolektorů byly zatím navrhovány podle celkové kontaminace. Přitom největší rizika představují minoritní složky NH_4^+ , Be, As, F a V. Řada těchto složek vykazuje značnou závislost na chemickém složení roztoků a vývoj jejich koncentrací bude v sanačním procesu odlišný než vývoj celkové solnosti. Řešení chemických procesů v podzemí pomocí laboratorních metod, termodynamických, kinetických a transportně-reakčních modelů poskytne podklady pro stanovení cílových hodnot pro jednotlivé složky namísto TDS. To může vést ke stanovení vyšších zbytkových hodnot v cenomanském kolektoru a k urychlení a zlevnění sanace.

2.1 Modely ve státním podniku DIAMO

Matematické modely v Diamu slouží převážně k upřesňování cílových parametrů a také k optimalizaci postupu při sanaci. Použité modely umožňují spojit poznatky z výzkumu, reálně probíhajících procesů a ekonomickou situaci, a tím poskytnout komplexní podklady k řešení.

Modely lze rozdělit z hlediska věcného do čtyř skupin:

Strukturní a situační modely popisují strukturu modelovaného objektu nebo stav v určitém okamžiku. Tyto modely samy o sobě nic neřeší, ale poskytují vstupní údaje pro modely vyšších typů.

Modely proudění a transportu látek používají pro výpočet numerické metody (FEM). Jsou závislé na prostorových souřadnicích. Výpočet se provádí v mnoha bodech uvnitř řešené oblasti a opakuje se v mnoha časových krocích.

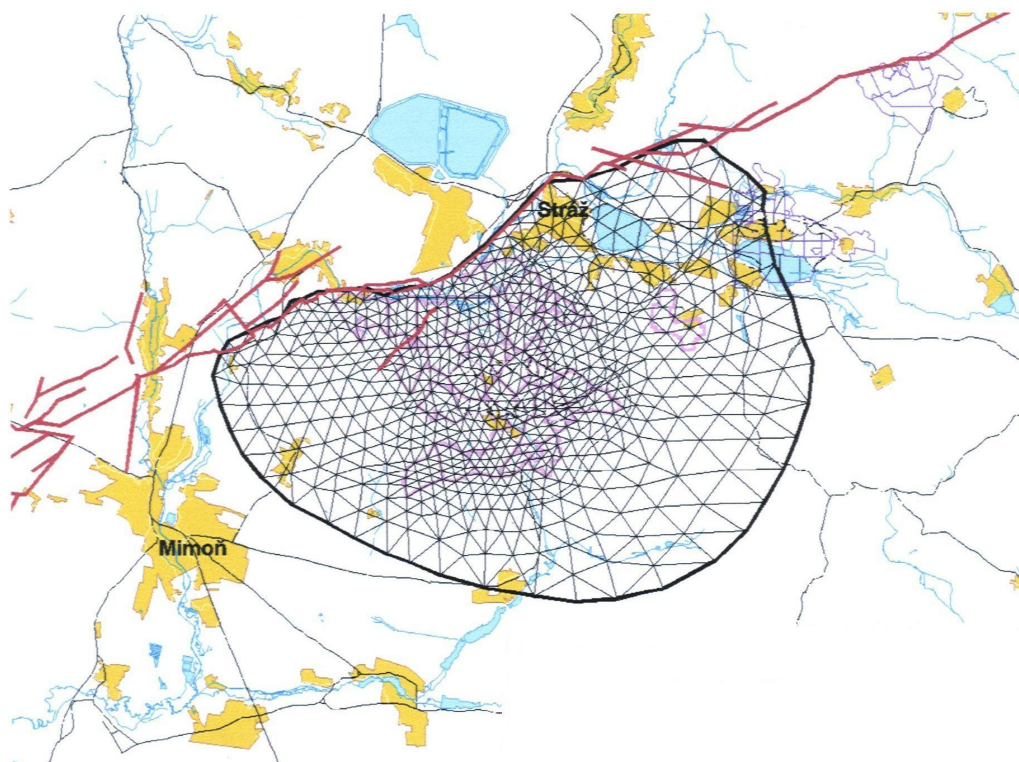
Termodynamické a kinetické modely se zabývají fyzikálně chemickými procesy, kde vzhledem k jejich měřítku buď vůbec nebo jen velmi málo záleží na prostorových souřadnicích.

Ekonomické a optimalizační modely slouží k hodnocení a porovnávání variant. Modely je nutné často aktualizovat, protože ekonomika se neustále mění.

Modely lze ovšem dělit i podle jiných hledisek, např. na stacionární (popisující nebo zobrazující rovnovážný stav) a dynamické (časový průběh dějů). Lze též dělit podle matematických postupů na analytické a numerické modely a dále podle konkrétních numerických metod. Práce již právě čtete, je spojena

s metodou konečných prvků a modelem pro sanaci v horninovém prostředí po chemické těžbě uranu na ložisku Stráž.

Model zahrnuje strukturně situační část složenou z modelové sítě oblasti, materiálů sítě, katalogu vrtů a způsobu otevření vrtů. Popis sítě lze rozdělit do čtyř částí (souborů). První, jež popisuje síť z globálního hlediska – maximální počet multiuzlů a multielementů, počet vrstev, jejich pojmenování, atd. Druhá oblast upřesňuje multiuzly sítě – označení multiuzlu, souřadnice x, y, výška povrchu sítě, čísla spodní a horní vrstvy, v kterých je multiuzel definován a výpis konkrétních výšek uzlů. Třetí část obsahuje definici multielementů – označení multielementu, tři hodnoty multiuzlů, vrstvy, do kterých spadá multielement a koeficienty multielementu. Jako poslední je popis materiálů sítě – označení multielementu, číslo vrstvy, číslo materiálu a jednotlivé koeficienty. Popis vrtů lze rozdělit do dvou částí (souborů). První tzv. katalog popisuje číslo vrtu, souřadnice x, y, nadmořskou výšku povrchu a textové označení vrtu, jakož to jeho jméno, které je provázáno na vyluhovací pole. Druhá část popisuje otevření vrtů. Skládá se z čísla vrtu, jeho hloubky a typu otevření (patou či filtrem). Tuto část lze nazývat výstroj vrtu.



Obrázek 2.1: Ložisko Stráž s modelovou sítí a vyluhovacími poli

Model ukrývá i modul proudění a transportu látek, jež se skládá ze samotného výpočtu konečných prvků, možnosti volby počítání s jednoduchou či dvojitou pórovitostí a využití chemického modelu. Před spuštěním samotného výpočtu je třeba spočítat okrajové podmínky. Ty se vypočítávají z měsíčních činností jednotlivých vrtů a bilance vyluhovacích polí. Činnost vrtů je popsána číslem vrtu, typem provozu (vtlačení či čerpání), měsícem, objemem za kalendářní měsíc, koncentrací TDS a uranu. Měsíční bilance neboli chemie polí se skládá z jmenného označení vyluhovacího pole a hodnot sledovaných chemických složek.

Výstupem z dosavadních strategických modelů jsou jednotlivé varianty sanace. Ty navrhnou optimální parametry pro sanaci (aktivní vrty, složení roztoků, množství ap.) v jednotlivých měsících nebo letech, podle toho za které období se provádí výpočet. Sanační model má vnější krok jeden rok a jeho kalibrace probíhala nepravidelně. Je třeba nalézt metodiku, která umožní kalibrovat v menších pravidelných intervalech.

Byl zahájen vývoj nových krátkodobých modelů, jež mají nejen časový krok jeden měsíc, ale i podrobnější síť elementů, aj. Jemnější síť elementů jež využívá metoda konečných prvků, může vést k přesnějším výsledkům modelů, založených na této metodě.

V případě mé úlohy výstupy tvořily měsíční přehledy koncentrací látek v multielementech, obsahující čerpací vrty, které se porovnávají s chemií vrtů za stejné období. Soubor chemií je tvořen textovým označením vrtu (jménem vrtu), datem analýzy a koncentracemi sledovaných látek. Druhá část mé diplomové práce sestavuje rozdíly koncentrací látek, které byly následovně statisticky zpracovány a zobrazeny.

2.2 Pojmy v modelovém systému

V této kapitole upřesním pojmy, jež je třeba znát pro porozumění tématu, jehož se týká tato diplomová práce.

2.2.1 Pojmy související s numerickým modelem

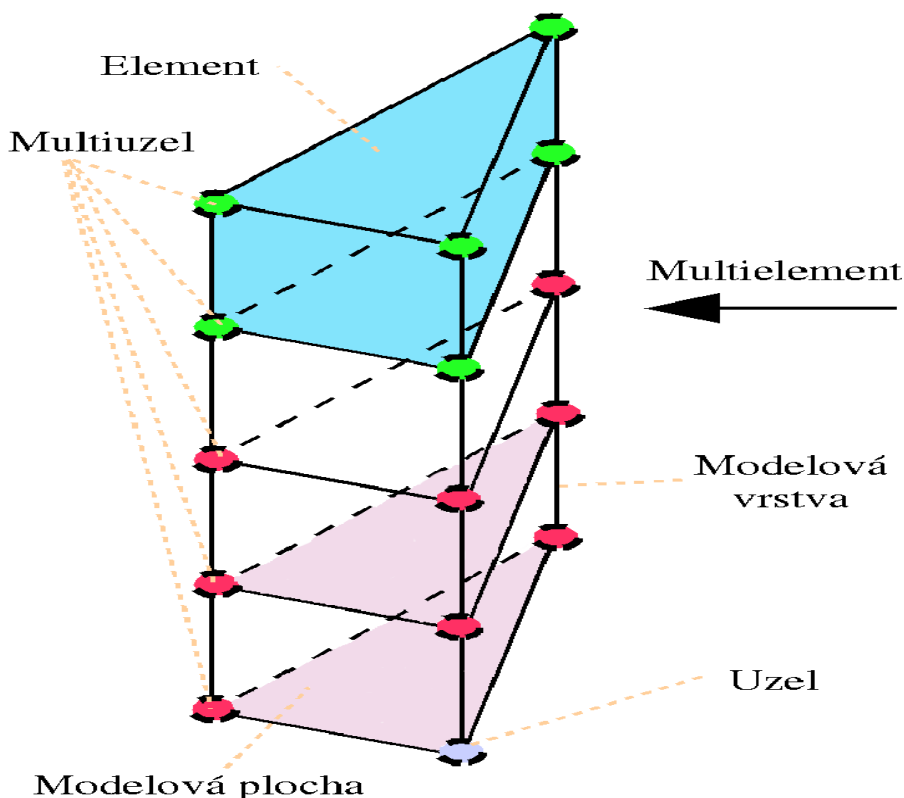
Element – základní prvek metody konečných prvků. Je složen ze šesti uzlů a má tvar svislého tříbokého hranolu.

Uzel – vrchol elementu, těžiště hrany, stěny, elementu

Multiuzel – řada uzlů nad sebou na svislici.

Multielement – makroprvek, vytvořený ze dvou nebo více elementů, poskládaných na sebe do sloupce.

Modelová síť – modelovaná oblast je diskretizována pomocí multielementů.



Obrázek 2.2: Vysvětlení pojmů v multielementu

Modelová vrstva – vrstva elementů, která většinou prochází celou sítí. Některé vrstvy díky geologické stavbě zanikají (zlomy, vyklínování). Systém vrstvy čísluje zdola od nuly. Pro uživatele jsou označeny textovým řetězcem (max 4 znaky) tzv. označení vrstvy. Geologická stavba oblasti je třívrstvá. Pro výpočet bylo zvoleno třináct vrstev, tzn. že jedné geologické vrstvě odpovídá několik vrstev modelových.

Modelová plocha – je plocha, která rozděluje jednotlivé modelové vrstvy. Systém plochy čísluje od nuly. Pro uživatele jsou označeny textovým řetězcem (maximálně 4 znaků).

Materiál sítě – každému elementu je přiřazeno číslo materiálu. Standardně je toto číslo rovno číslu modelové vrstvy. Představuje fyzikální vlastnosti horninového prostředí, což je ku příkladu propustnost daná koeficientem filtrace v osách x,y,z, či pórovitost (jednoduchá, dvojitá).

Okrajové podmínky – jsou veličiny popisující, co se děje na okraji modelované oblasti. V případě modelů v DIAMU jsou to tlakové výšky a průtok. Pokud stěna elementu na okraji oblasti nemá okrajovou podmínku, je nepropustná (např. stěnu elementu tvoří kontakt s nepropustnou horninou). Z formálního hlediska trochu nesprávně sem patří i definice zdrojů a propadů v síti (vrty popsané průtokem). Důležitá vlastnost okrajových podmínek je řízení celé činnosti modelu.

Počáteční podmínky – veličiny popisující stav v podzemí na počátku výpočtu. V případě modelu v DIAMU udávají, jak jsou rozloženy složky kontaminace a reagující minerály na počátku výpočetního kroku.

2.2.2 Pojmy související s realitou chemické těžby

Čerpací vrt – slouží k získání roztoku obohaceného uranem z podzemí. Doposud jsou:

- **Liftový vrt** – tekutina je získávána vháněním stlačeného vzduchu do podzemí.
- **Čerpadlový vrt** – čerpaní je prováděno pomocí čerpadla.

Vtláčecí vrt – vtláčení probíhá samospádem, do výše položených oblastí je roztok dopravován pomocí čerpadel. Tímto vrtem se vtláčí roztoky do vyluhovacích polí.

Vyluhovací pole – je těžební jednotka (oblast), ve které se nachází několik desítek až stovek vrtů se stejným počátečním označením, což je i název vyluhovacího pole.

Otevření vrtu – v které hloubce (vrstvě) je vrt otevřen. Může být filtrem (perforovanou pažnicí) či patou (nezapažená spodní část vrtu).

Chemická stanice – technologické zařízení, kde probíhá sorbce uranu na ionexu.

Sorpční odpad – výstupní roztok z chemické stanice po sorbci uranu. V době těžby se z něho připravoval loužící roztok s přísadkou kyseliny a v době sanace se vtláčí zpět do ložiska bez úpravy.

Kapitola 3

Analýza problému

Zaměřil jsem se na modely, popisující děje v podpovrchových oblastech. Seznámení s problematikou a proudění podzemních vod bylo pro mne prvním krokem. Následovalo částečné proniknutí do modelu, jenž simuloval podzemní proudění a transport látek. Abych lépe porozuměl problému, navštívil jsem podnik Diamo ve Stráži pod Ralskem. Zde jsem se seznamoval s prostředím modelu, jeho částmi a na konec mi byla předvedena názorná ukázka řešení. Prohlédl jsem si část provozní databáze a některé soubory používané pro řízení výpočtu, pro vstup a výstup údajů. Zprvu mě vlastní model velice překvapil, protože jako student jsem neměl žádnou možnost se setkat s tak objemným modelem. Jak se později ukázalo, stačila mi jen určitá část z velkého komplexu, abych porozuměl problematice.

Je zřejmé, že podnik DIAMO má záměr zkvalitnit model pro sanaci strážského bloku. Proto neustále opravuje a zdokonaluje stávající modely. Jedny z kroků jak vylepšit model byly zjemnit síť prvků a krok výpočtu. Délka dosavadního vnějšího kroku modelování představovala až jeden rok, kdežto nový výpočetní krok má mít délku jednoho až tří kalendářních měsíců. Zjemnění kroku se projeví také v okrajových podmínkách, které řídí celý výpočet. Aby model měl platná aktuální data, je nutné kalibrovat. Kalibrační funkce doposud není stanovena, je ji třeba vytvořit. Již nyní však lze připravit data pro kalibrační proces a to je část mé práce. Sice z rozdílů reálných a modelových hodnot nelze přímo kalibrovat, ale je možno poupravit počáteční podmínky, jež nebyly doposud přesně sestaveny.

Rozšíření výstupů o další chemické prvky, což také přispělo k zpřesnění modelu, mělo přímou vazbu na databázi chemických analýz jednotlivých vrtů. Při těžbě se využívaly pouze koncentrace TDS a uranu, kdežto pro sanaci se využívá až 9 složek.

Model pracuje s celou řadou vstupních a výstupních souborů. Pro účely kalibrace je nutné tvorbu některých souborů zautomatizovat. Otázka preprocesingu, jež je hlavní částí diplomové práce, spočívá v nalezení multielementu, který obsahuje aktivní čerpací vrt. Funkce přiřadí aktuální data o provozu vrtů do vybraných vrstev v multielementu, z nichž se spočítá objem, který je součástí okrajových podmínek. Všechny výpočty se provádějí za zadaný časový krok, nejméně však za každý kalendářní měsíc. Výstupem jsou okrajové podmínky, jež jsou použity jako vstup pro výpočet transportu a proudění látek.

Hlavním cílem mé práce je porovnání reálných dat, jež se skládají z chemické analýzy některých sledovaných vrtů, s výsledky modelů. Musel jsem zvolit vhodný výstup z modelu pro realizaci rozdílů. Vybral jsem si výstup ve formě koncentrací látek v multielementech. Před výpočtem bylo nutno upravit soubor s okrajovými podmínkami, což byly mnou sestavené a spočítané hodnoty, vlastně generované programem. Nezbytnou součástí nutnou pro výpočet proudění a transportu látek je úprava řídicího souboru. Doplnil jsem soubor o data, jež opět sestavil můj program. Výpočetní algoritmus, jež obstarává přípravu okrajových podmínek, sestavení části dat pro řídicí soubor a jiné.

Po provedení výpočtu, za každý měsíc, bylo nutné získat data z výstupního souboru modelu, jež byl v neobvyklém tvaru. Protože nová modelová síť je navržena tak, že každý čerpací vrt je přiřazen jednomu multielementu, musel jsem přiřadit všem vrtům, jejichž výčet je v souboru s chemickou analýzou, odpovídající multielement v modelové síti. To mi umožní porovnávat dva multielementy, kdežto ve skutečnosti porovnávám dva čerpací vrty, reálný a modelový. Data jsem v závěru statisticky zhodnotil a vykreslil mapy koncentrací některých sledovaných látek (SO_4 a NH_4) za jeden měsíc. Abych mohl zhodnotit výsledky i z hlediska dlouhodobého, sledoval jsem modelové a reálné koncentrace jednoho vrtu ve dvanácti měsících. Rozdíly jsem zakreslil do grafů. Sestavení souborů pro závěrečné vyhodnocení bylo realizováno mým druhým programem.

3.1 Algoritmizace problému

Sít sanačního modelu se skládá ze čtyř souborů. Definována je souborem (.SIT), kde je maximální počet elementů, uzlů, vrstev. Lze zde získat i jména vrstev atd. Souřadnice x , y multiuzlů a souřadnice z každého uzlu příslušného multiuzlu jsou v souboru (.STU). Elementy popisuje soubor (.STE) a materiály lze získat ze souboru (.STM). Tím je určena lokalizace každého elementu sítě a jeho materiál.

Součástí databáze je vrtný katalog (katalog.VRT), kde lze ke každému vrtu nalézt souřadnice jeho ústí x , y , z , jméno, hloubku a způsob otevření (vystroj.VRT).

Provozní soubory databáze (cinnost.VRT) mimo jiné obsahují údaje o objemu čerpaného či vtlačeného roztoku a o částečném chemickém složení tohoto roztoku pro každý vrt. Součástí údajů je i kalendářní měsíc a rok, kdy byl vrt v činnosti. Podrobnější chemická analýza vrtu je rozdělena na dvě části. Pro čerpání je údaj o každém činném vrtu v roce uložen v souboru (chemie.VRT), kdežto pro vtlačení se využívá chemické analýzy, jež se provádí pro celé vyluhovací pole (chemie_x.y.POLE).

Je třeba přiřadit jednotlivé vrty na vyluhovacích polích příslušným elementům sítě, tzn. určit multielement, do něž vrt spadá a element (elementy) v nichž je vrt otevřen. Podle počtu elementů v multielementu, jimž bylo přiřazeno otevření, se vypočítává celková objemová bilance v multielementu. Což jsou právě zmiňované okrajové podmínky.

Pro každý kalendářní měsíc v určeném období je třeba sestavit soubor okrajových podmínek (.OKE) pro sanační model, v němž kromě stabilních okrajových podmínek na okraji modelu budou definovány zdroje a propady, tzn. množství čerpané nebo vtlačené pro jednotlivé elementy. Řešenou úlohu je třeba sestavit tak, aby byl proveden výpočet proudění a reaktivního transportu látek za každý kalendářní měsíc s příslušnými soubory okrajových podmínek a daty doplňující řídicí soubor výpočtu.

Výstup z modelu je ve formě koncentrací sledovaných složek roztoku v multielementech. Reálné údaje jsou ve vztahu vrt-chemie. Je nutné opět zajistit postup, jak přiřadit vrtu multielement. Avšak tuto operaci jsem znovu neřešil a využil jsem toho, že již byla řešena v předchozím kroku. Z hlediska výpočetního času bylo výhodnější načíst soubor s již přiřazením, než znovu párovat vrt a multielement. Nyní mám k dispozici dvě skupiny jež se dají navzájem přímo porovnávat. Sestavení rozdílů koncentrací ve schodných multielementech z reálné a modelové oblasti, umožňuje získání informací o kvalitě modelu na nové výpočetní síti s nově sestavenými okrajovými podmínkami.

Výsledky jsem zpracoval statisticky ve formy tabulky a rozložení koncentrací a jejich rozdílů ve formě map. Dále pro zajímavost jsem sledoval jeden vybraný vrt s měsíčním krokem po celý rok 1999.

Kapitola 4

Řešení úlohy

Pro implementaci algoritmu byl zvolen jazyk C a prostředí Microsoft Developer Studio 6.00. Moduly a program jsou až na malé výjimky přenositelné na platformy DOS, Windows a Linux. Při programování byl hlavně brán zřetel na vizuální srozumitelnost kódu a nezabýval jsem se jeho optimalizací, kterou jsem nechal na překladači. Příprava dat na počítači Athlon 650 MHz a 128MB RAM trvala 3 minuty a porovnání dat několik sekund. Program byl vytvořen především pro účely testování a jedná se tedy o vývojovou verzi programu.

4.1 Výchozí pozice

Státní podnik DIAMO mi poskytl model pro výpočet proudění (GenFlow.exe) a transportu (GenTran.exe) látek ve strážském bloku pro cenomanskou část. Dále jsem získal modelovou síť, katalog všech vrtů s otevřením, provozní činnost vrtů za rok 1999 a jejich chemické složení a analýzou roztoků z vyluhovacích polí.

4.2 Metodika řešení

Zvolil jsem formát html, protože je nezávislý na operačním systému. Strukturu jsem se pokusil dodržet s ostatními soubory, jež popisují model. Má to výhodu, že lidé zvyklí na tento styl se budou dobře orientovat v dokumentu.

V této kapitole popíši hlavičkový soubor, některé části modulů programu a hlavní řídicí soubor. Nemá cenu, abych zde vysvětloval detaily. Pokud bude někdo potřebovat podrobnější informace, rád mu je poskytnu, či se bude muset seznámit s celým programem důkladněji. Cílem je nastínit algoritmy a vysvětlit některé kroky.

4.2.1 Hlavičkový soubor `b_head.h`

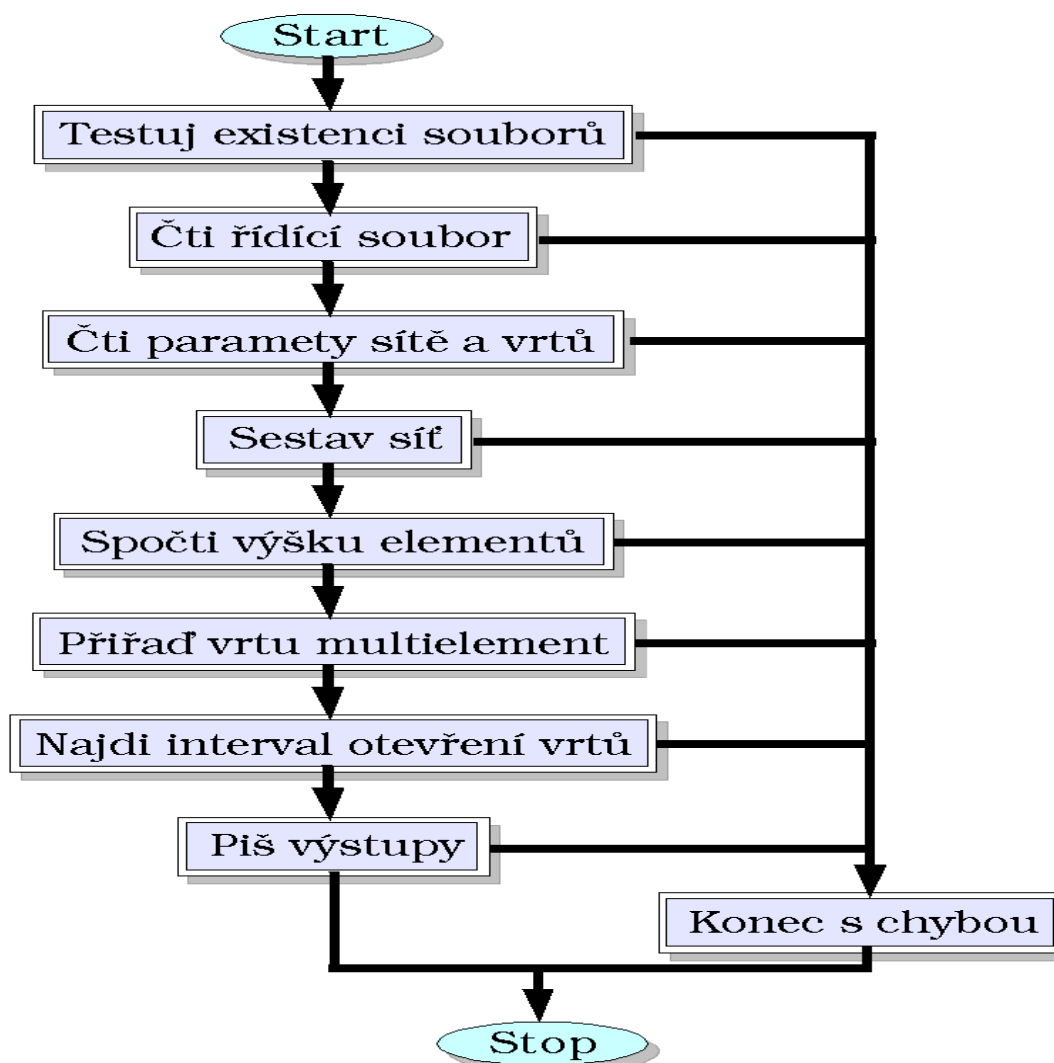
Proč hlavičkový soubor? Již v první fázi vývoje programu jsem pocítil nutnost globálních proměnných pro přístup z různých modulů. Později jsem našel výhodu v modulárním programování a nutnost hlavičkového souboru se mi potvrdila. Získal jsem tedy přístup ke globálním proměnným, konstantám a funkcím ve všech modulech. Někdy však bylo výhodnější použít lokální funkci, která byla rychlejší a efektivní, než obecná funkce definovaná v hlavičkovém souboru. Proměnné, konstanty, datové struktury a funkce jsou společné pro oba programy.

Na začátku mého hlavičkového souboru se načítají soubory, ve kterých jsou definovány funkce pro přístup ke vstupům a výstupům z programu, pro práci s pamětí a řetězci, pro matematické operace a pro systémové funkce. Aby se mi nedefinovaly proměnné ve všech modulech, nýbrž pouze jednou, použil jsem funkci *ifdef* a *define*, která mi zaručí pouze jednu definici, tam kde si ji určím. Zvolil jsem si tedy hlavní soubor. Níže v sekci **Definice globálních proměnných** nalezneme natypování proměnných pro jména souborů, vstupních i výstupních a globálních konstant. Dále jsou nadefinované datové struktury a *pointry*, jež později slouží pro ukládání hodnot. A v poslední řadě předřadná deklarace funkcí.

4.2.2 Sestavení OKP

Hlavní soubor "pripava.c" tvoří kořen celého programu má jednoduchou strukturu, protože obsahuje převážně hlavičky funkcí, jež vykonávají potřebné algoritmy v modulech.

1. Jako první se testuje existence souborů, tím si zaručím, že jsem ve správném adresáři a budu moci načítat data.
2. Druhá fáze byla zaměřena na načítání hodnot ze souborů.
 - (a) Bylo nutno si ujasnit a dohodnout standardní oddělovač. Oddělování číselných dat mezerou a středníkem se stalo standardem ve výstupech a vstupech modelu.
 - (b) Některé soubory obsahovaly ještě textovou hlavičku, kterou bylo zapotřebí předem odstranit, aby nevznikl problém při načtení číselných údajů.
 - (c) Načítání hodnot ze souborů do proměnných bylo řešeno po řádcích. Načetl se celý řádek a postupně se z něho získávala data,



Obrázek 4.1: Stručný vývojový diagram pro přípravu dat

jež byla oddělena mezerou či středníkem. Data se ukládala do dynamicky alokovaných míst v paměti. Velikost alokovaného místa se určovalo podle počtu řádků v souboru.

- (d) Speciálním případem se staly řídicí či nastavovací soubory (.CON). Mají za úkol říci programům, jak mají nastavit některé proměnné, kde jsou umístěny soubory se vstupními daty a kam se mají zapisovat výstupy. Zde je použito jako oddělovač rovnítko, protože data se získávají funkcí přístupnou z knihovny funkcí pro psaní a čtení logovacích souborů.

- (e) Mezi algoritmy sloužící k načítání hodnot patří i získávání údajů o síti, jakožto maximální počet elementů, uzlů, jména vrstev, parametry sítě, síť jakož to celek, vrtů a polí
3. Z načtených údajů je nutno sestavit modelovou síť, informace o vrtech a polích.
 4. Algoritmizace metody, jak nalézt odpovídající element k vrtu v tak rozsáhlé oblasti. Inspiraci jsem našel ve vybraným předmětech, které jsem studoval v předchozích letech. Algoritmy musely být efektivní ve vyhledávání, tím se velice zúžil výběr z možných řešení. K vyhledávání multielementu je použito ohraničení pomocí čtvercové oblasti okolo aktivního vrtu. Tato oblast je menší než kompletní modelová oblast, což urychluje výpočet. Každý multielement jehož alespoň jeden vrchol je v této oblasti je prohledáván, zda obsahuje hledaný vrt nebo ne. Vyhledávací algoritmus je založen na vektorovém součinu.
 - (a) Zvolil jsem výběr pomocí jistého okolí bodu. Vše spočívalo v tom, že bylo experimentálně zvoleno okolí hledaného bodu, jak ve směru x tak ve směru y . Vznikla virtuální čtvercová podoblast pro vyhledávání, jež byla zanedbatelně menší než původní rozsáhlá oblast.
 - (b) Zavedení virtuálního okolí na tak velké oblasti, mi pomohlo vyseparovat několik desítek elementů. To byl veliký krok, jak urychlit nalezení prvku. Dále bylo zapotřebí jednoznačně určit element v odoblasti, který odpovídá hledanému vrtu. Řešení jsem našel ve vzájemné poloze bodu a obecného trojúhelníka.
 - (c) Multielement je určen vrcholy trojúhelníka a hledaný bod má přímou vazbu na vrcholy trojúhelníka (elementu). Použil jsem metodu založenou na vektorovém součinu orientovaném kladně (ve smyslu proti hodinovým ručičkám). Velice se osvědčila, jak vzhledem k rychlosti tak i v jednoduchosti implementace. Metoda je schopná určit zda je bod uvnitř trojúhelníka, vně a nebo zda se nachází bod přímo na úsečce spojující vrcholy trojúhelníka. Možnost prohlédnutí detailnějšího postupu v grafické podobě je možno v kapitole [5.1](#).
 5. Ještě než se zjistí, v kterých elementech je vrt otevřen, výpočtem se výšky jednotlivých elementů.

6. Ve vybraném multielementu je zapotřebí najít, ve kterých vrstvách je vrt otevřen. K tomu je využito opět vektorového součinu, dále pak popisu roviny a vzájemné polohy bodu a roviny.
7. Vrstvám, v nichž je vrt otevřen, se přiřazují data po výpočtech. Ty zahrnují spočtení koncentrací a objemů příslušných na každou vrstvu, s rozlišením zda se čerpalo, či se do nich vtláčelo. Zde jsem použil algoritmu pro určení vzdálenosti bodu a roviny. Báze každého elementu je popsána třemi uzly. Těmito uzly se proloží rovina. Zjistí se hodnota zetové souřadnice plochy v bodě vrtu (x, y) . Toto číslo je porovnáváno s intervalem otevření vrtu. Výstup jsou vrstvy, do kterých zasahuje otevření vrtu. Praktický příklad v 5.2.
8. Za každý kalendářní měsíc se načítají údaje o činnostech do paměti. Aktivnímu vrtu už jsem schopen přiřadit multielement a jeho vrstvy. Spočítají se objemy do jednotlivých elementů podle následujícího vzorce:

$$Q_i = \sum_j \frac{Q_j \cdot m_{ij} \cdot k_i}{\sum_i m_{ij} \cdot k_i} \quad (4.1)$$

Kde:

i – je index vrstvy (elementu) v multielementu

j – je index vrtu, který spadá do daného multielementu

Q_i – je průtok j -tým vrtem (vtlačení s kladným, čerpání se záporným znaménkem)

m_{ij} – je délka otevřeného intervalu j -tého vrtu v i -té vrstvě (elementu)

k_i – je koeficient filtrace i -tého elementu

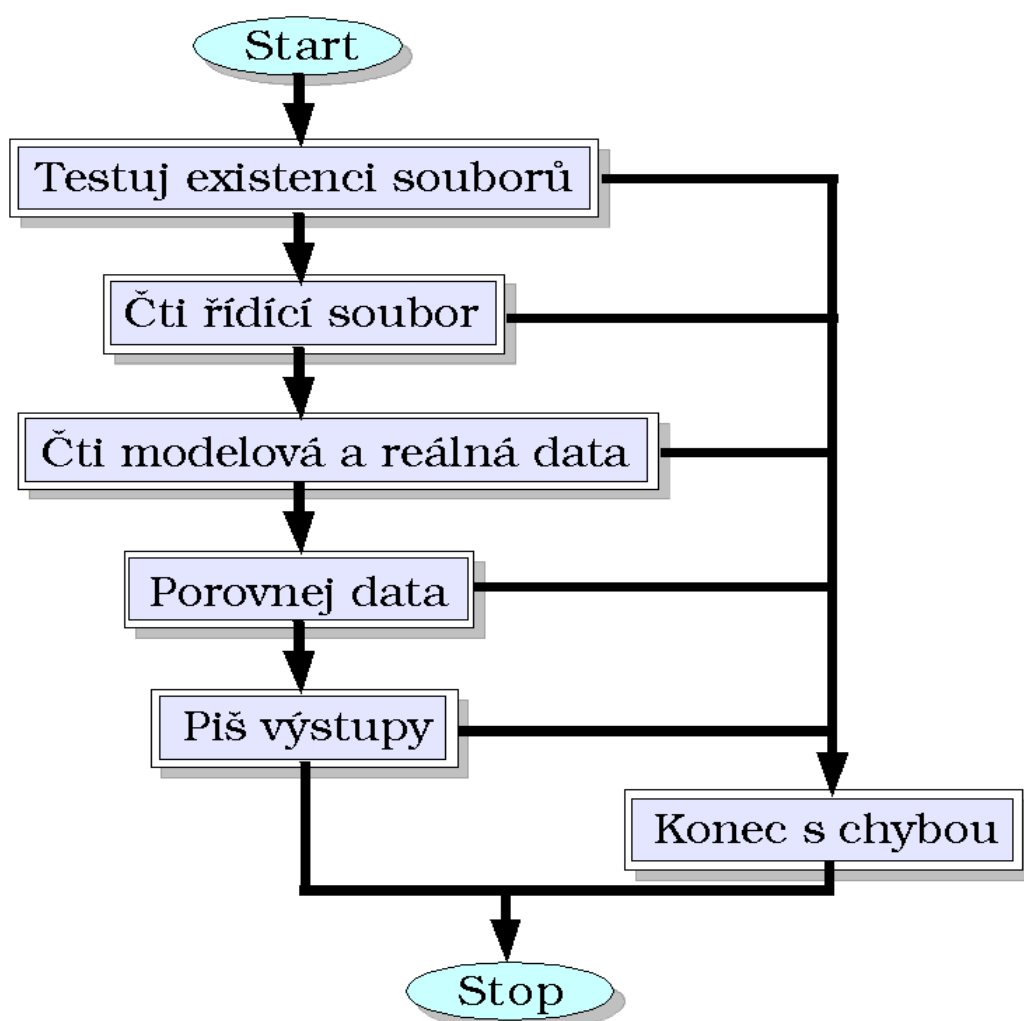
9. Po zpracování všech údajů za měsíc se zapíše do výstupního souboru příslušná data za kalendářní měsíc. Tento cyklus se opakuje pro celé hodnocené období, např. pro kalendářní rok. Výstupní soubor má koncovku (.2OKE). Tuto variantu jsem zvolil pro zjednodušení. V modelu se vyskytuje spousta souborů a neznalému člověku, jež by chtěl s modelem pracovat nebude na první pohled jasné kam se má co kopírovat. Proto 2OKE jako "to-OKE". Obsah souboru se přidá na konec souboru (.OKE).
10. Druhým důležitým výstupem z programu pro přípravu dat je soubor (.2MMF). Bystrého čtenáře napadne, že tento soubor se bude přidávat do řídicího souboru pro výpočet, jež bude mít příponu (.MMF). Tento soubor obsahuje typy vod, jež jsou nutné pro výpočet. Ty zaručí, že se jednotlivé elementy neslejí dohromady. Máme dva druhy vod. Čerpací,

zde stačí zadat číslo, jež je v typech vod jedinečné a vtláčečí, kde se ještě k typu přidává chemické složení roztoku.

Podrobný popis souborů je v příloze na CD-ROMu, v adresáři popis souborů.

4.2.3 Porovnání

Nebo-li sestavení rozdílů mezi modelem a skutečností.



Obrázek 4.2: Stručný vývojový diagram pro přípravu dat

1. Jako první se testuje existence souborů, tím si zaručím, že jsem ve správném adresáři a budu moci načítat data.
2. Druhá fáze byla zaměřena na načítání hodnot ze souborů. Tu zde nebudu již rozvádět, protože je stejná jako v předchozím programu.
3. Třetí krok byl ve vypsání skutečných chemií vrtů za každý kalendářní měsíc. Avšak je zde háček, chemická analýza se provádí jednou za kvartál, tudíž se musí rozdělit chemická analýza do další dvou měsíců ve čtvrtletí.
4. Předposlední fáze spočívá v načtení činností vrtů v daném měsíci, abych mohl spočítat koncentraci, která je vázána na objem. Tím že jsem načetl měsíční činnost vrtů jsem také získal údaj, který mi říká do kterého elementu spadá vrt.
5. Nyní mohu porovnávat dva shodné elementy s reálnými a modelovými údaji s tím, že reálné koncentrace se ještě váží na celkový objem v multielementu a právě vtláčeném množství podle vzorce v [4.2](#)

$$c = \frac{Q_c}{Q_v} * c_v \quad (4.2)$$

Kde:

c – je výsledná koncentrace

Q_c – je celkový objem v multielementu, převzatý z OKE

Q_v – je čerpaný objem vrtu

4.3 Výsledky

Ukázky výstupních souborů programu pro přípravu dat. První část ukazuje, jak vypadá soubor (.2OKE) s vygenerovanými okrajovými podmínkami, které se přidají do souboru (.OKE) za okrajové podmínky.

```
[Cinnost_Elementu_99_1]
201 1502 245 6 2 3 62.067 0
201 1507 287 6 2 3 88.467 0
201 1507 290 6 2 3 491.033 0
201 1507 302 6 2 3 12.000 0
201 1511 318 6 2 3 -520.133 0
201 1507 319 6 2 3 217.633 0
201 1507 326 6 2 3 35.000 0
```

Druhá část zobrazuje soubor (.2MMF) typů vod, jež byli sestaveny programem. Obsah souboru je přidán do řídicího souboru (.MMF) pro výpočet proudění a transportu látek.

```
[WATER_0]
Marker=1501
Fe=1.05 g/l
NH4=0.65 g/l
Al=4.66 g/l
SO4=36.06 g/l
NO3=1.24 g/l
F=0.17 g/l
```

. . .

```
[WATER_5]
Marker=1510
```

```
[WATER_6]
Marker=1511
```

Pro porovnání výsledků jsem zvolil tři metody. První metoda je statistická, kdy jsem zpracoval za každý měsíc reálné a modelové koncentrace SO_4 a NH_4 . Spočítal střední hodnoty, rozptyly, směrodatné odchylky a procentuální poměry. Pro výpočet střední hodnoty jsem vycházel ze vztahu 4.3, rozptyl podle 4.4 a směrodatnou odchylku z 4.5.

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (4.3)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \quad (4.4)$$

$$s = \sigma \quad (4.5)$$

Kde:

x_i – i -tý prvek ve výběru

\bar{x} – střední hodnota

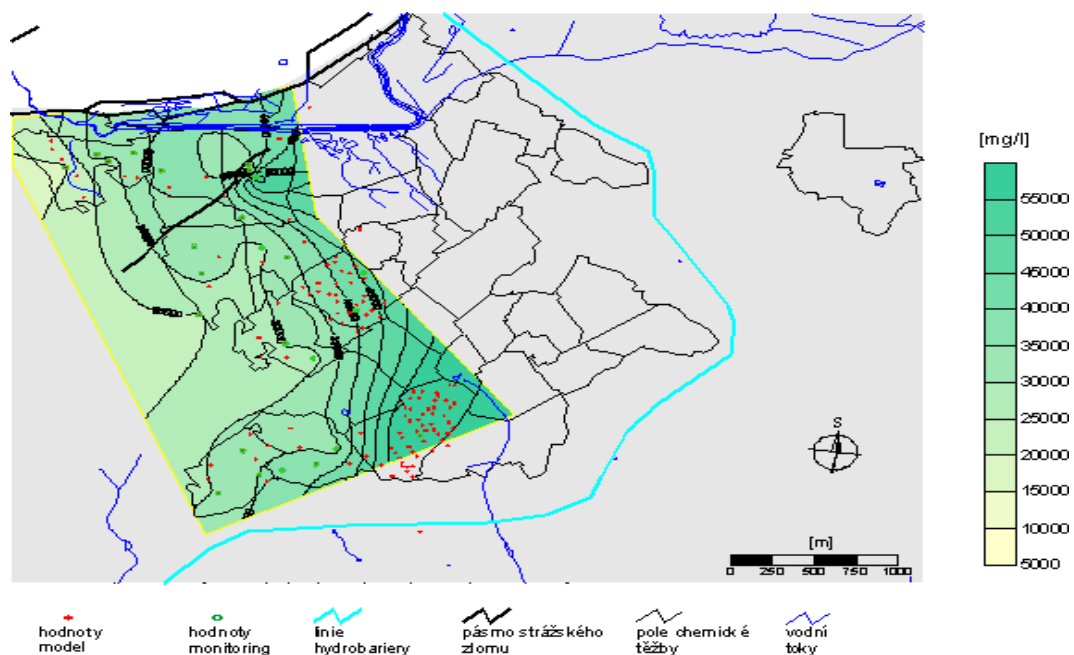
σ^2 – rozptyl

s – směrodatná odchylka

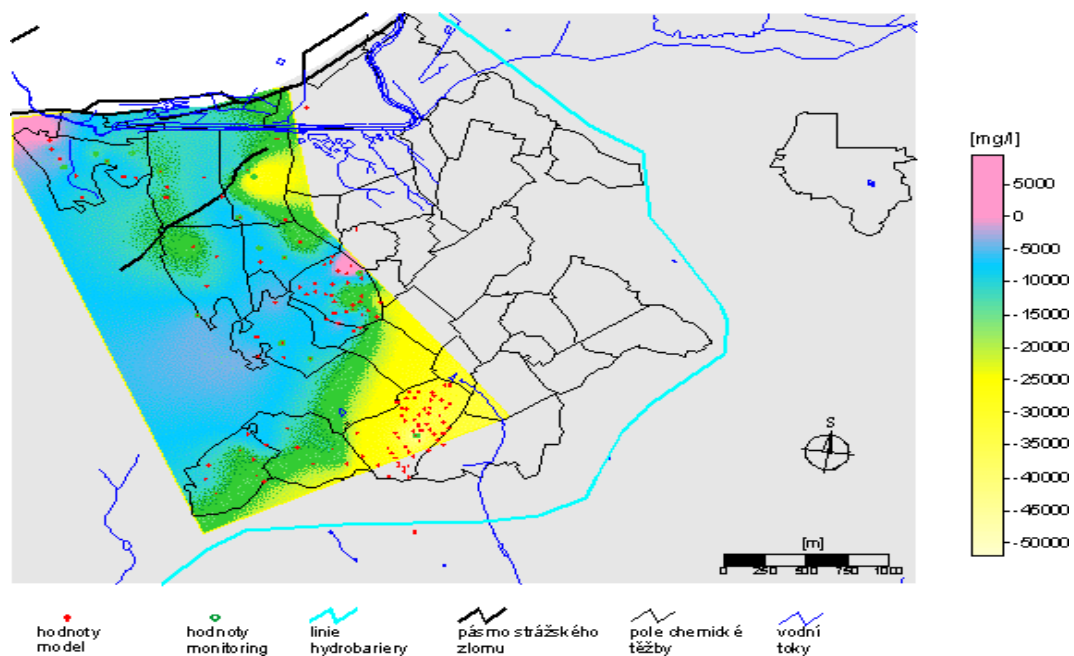
Měsíc	Koncentrace	SO ₄				NO ₄			
		\bar{x} [g/l]	σ [g/l]	σ^2 [g/l]	Rozdíl [%]	\bar{x} [g/l]	σ [g/l]	σ^2 [g/l]	Rozdíl [%]
1	Modelové	25,20	6,29	39,56	23,94	0,54	0,18	0,03	43,16
	Realné	33,13	7,67	58,80		0,95	0,39	0,15	
2	Modelové	24,91	6,01	36,17	22,83	0,53	0,17	0,03	39,08
	Realné	32,28	5,71	32,58		0,87	0,34	0,11	
3	Modelové	25,42	6,21	38,54	26,66	0,54	0,18	0,03	50
	Realné	34,66	9,87	97,43		1,08	0,62	0,39	
4	Modelové	25,21	6,23	38,76	23,79	0,53	0,17	0,03	45,36
	Realné	33,08	8,25	68,09		0,97	0,39	0,15	
5	Modelové	25,40	6,21	38,59	24,02	0,54	0,18	0,03	46
	Realné	33,43	9,00	80,91		1,00	0,52	0,27	
6	Modelové	25,41	6,10	37,22	17,85	0,54	0,17	0,03	39,33
	Realné	30,93	7,40	54,74		0,89	0,38	0,15	
7	Modelové	25,17	5,84	34,05	18,6	0,54	0,16	0,03	40
	Realné	30,92	8,20	67,27		0,90	0,40	0,16	
8	Modelové	26,49	6,22	38,49	20,26	0,60	0,23	0,05	40,59
	Realné	33,22	7,98	63,62		1,01	0,48	0,23	
9	Modelové	26,40	6,15	37,88	23,12	0,59	0,22	0,05	43,27
	Realné	34,34	8,84	78,13		1,04	0,47	0,23	
10	Modelové	26,28	6,05	36,63	19,01	0,59	0,22	0,05	37,23
	Realné	32,45	5,88	34,62		0,94	0,35	0,12	
11	Modelové	26,11	6,15	37,96	18,64	0,58	0,22	0,05	39,58
	Realné	32,09	5,79	33,53		0,96	0,38	0,14	
12	Modelové	26,19	6,01	36,07	22,01	0,59	0,22	0,05	41,58
	Realné	33,58	7,49	56,03		1,01	0,39	0,15	

Obrázek 4.3: Statistické výpočty sledovaných koncentrací za rok 1999

Druhá porovnávací metoda spočívala ve vykreslení map koncentrací a jejich zhodnocení. Protože tyto obrázky by ztrácely na kvalitě, jsou uvedeny v příloze A v původní velikosti a zde jsou některé pouze pro ilustraci zmenšené.

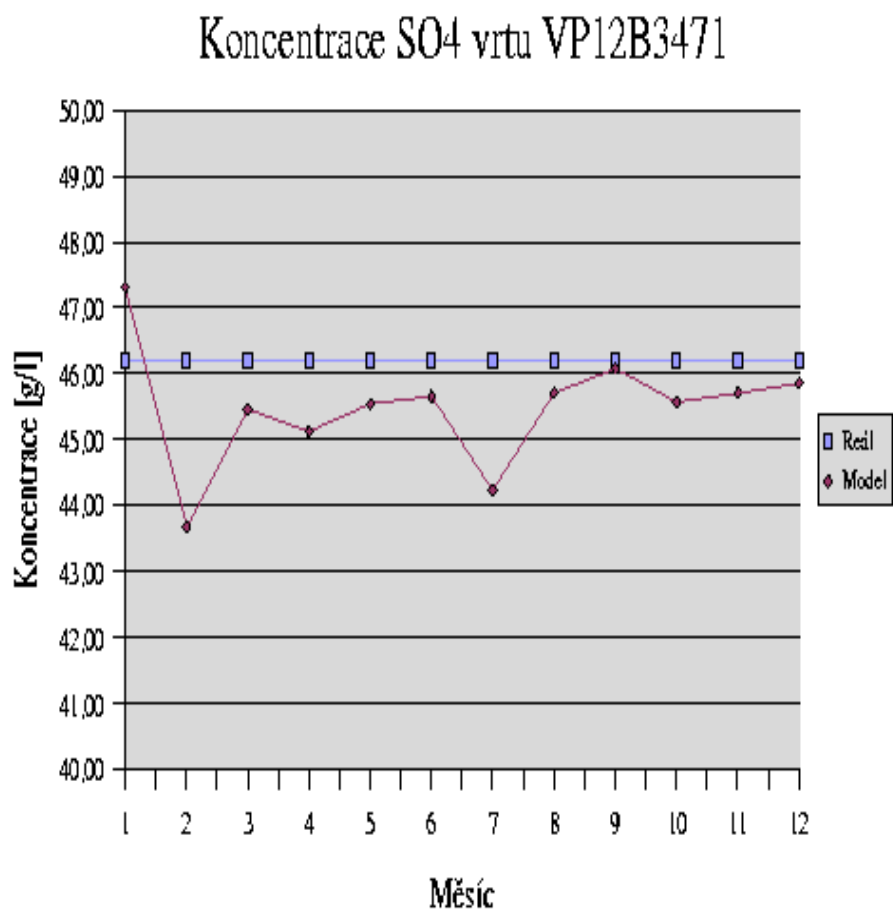


Obrázek 4.4: Mapa modelových koncentrací SO_4 sledované oblasti



Obrázek 4.5: Mapa rozdílů koncentrací SO_4 sledované oblasti

Třetí porovnávací metoda posuzovala jeden sledovný vrt v modelu a ve skutečnosti.



Obrázek 4.6: Sledovaná reálná a modelová koncentrace SO₄ vrtu VP12B3471 v roce 1999

Kapitola 5

Ukázka algoritmů

5.1 Nalezení elementu v oblasti

Tento příklad znázorňuje postup nalezení trojúhelníkového elementu, obsahujícího daný bod, v oblasti trojúhelníků.

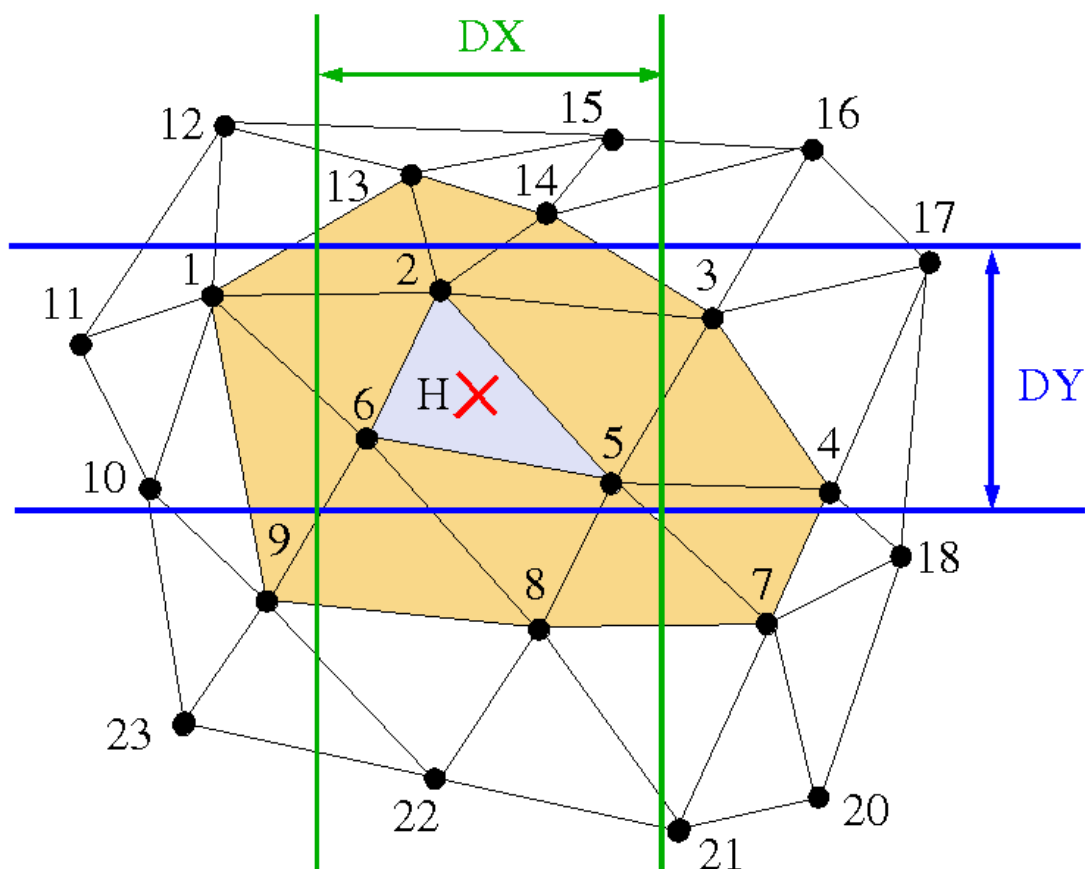
Předpokládejme, že naše oblast je tvořena dvacetitřemi elementy, avšak pro výpočet tohoto příkladu je zapotřebí pouze prvních devíti uzlů, tedy i devíti elementů. Viz. obrázek 5.1. Zaveďme značení uzlů písmenem A a příslušným číslem uzlu. Příklad A_1 , A_2 a atd. Dále předpokládejme tyto souřadnice uzlů:

$$\begin{array}{lll} A_1 = [0.9, 3] & A_2 = [1.7, 3.2] & A_3 = [3.5, 3.1] \\ A_4 = [4.5, 2] & A_5 = [3, 2] & A_6 = [1.5, 2] \\ A_7 = [4, 1] & A_8 = [2, 1.1] & A_9 = [1, 1.2] \\ A_{13} = [2.6, 4] & A_{14} = [3, 3.8] & \end{array}$$

Souřadnice jsou pouze ilustrativní a neodpovídají *přesně* zobrazené síti na obrázku 5.1. Již předem víme, že zadaný bod, označme ho H , bude mít následující souřadnice $H = [1.8, 2.2]$. Také víme rozměry pro okolí, vyjádříme je pomocí DX a DY , jež představují čtyři asymptoty okolo bodu. Položme $DX = 2$ a $DY = 1.8$.

Po porovnání souřadnic všech uzlů, zda zapadají do vybrané oblasti, zjistíme, že podmínce vyhovují uzly, A_2 , A_5 a A_6 . Algoritmus říká, vyber všechny elementy, jímž patří uzly vyhovující podmínce DX a DY . Mezi výsledkem je pole elementů, které je podstatně menší než původní oblast. Na mezivýsledek aplikujeme jednoduchý vektorový součin a to pro všechny tři možnosti vrcholů a hledaného bodu.

Souřadnice hledaného bodu jsou $H = [1.8, 2.2]$ a vrcholy elementu jsou $A_2 = [1.7, 3.2]$, $A_5 = [3, 2]$ a $A_6 = [1.5, 2]$. Spočteme jednotlivé vektorové součiny a označme je S_1 , S_2 a S_3 .



Obrázek 5.1: Ukázková síť s vrtem a oblastí DX a DY

S_1 je vektorový součin vektorů $\overrightarrow{A_6A_5}$ a $\overrightarrow{A_6H}$
 S_2 je vektorový součin vektorů $\overrightarrow{A_5A_2}$ a $\overrightarrow{A_5H}$
 S_3 je vektorový součin vektorů $\overrightarrow{A_2A_6}$ a $\overrightarrow{A_2H}$

Zaved'me $x(H)$ jako souřadnice x bodu H . Ostatní již analogicky $y(H)$.

$$S1 = (x(H) - x(A6))(x(A5) - x(A6)) + (y(H) - y(A6))(y(A5) - y(A6)) \quad (5.1)$$

$$S2 = (x(H) - x(A5))(x(A2) - x(A5)) + (y(H) - y(A5))(y(A2) - y(A5)) \quad (5.2)$$

$$S3 = (x(H) - x(A2))(x(A6) - x(A2)) + (y(H) - y(A2))(y(A6) - y(A2)) \quad (5.3)$$

dosazením do rovnice 5.1 dostaneme:

$$S1 = (1.8 - 1.5)(3 - 1.5) + (2.2 - 2)(2 - 2) = 0.45$$

$$S2 = 1.8$$

$$S3 = 1$$

Všechny tři součiny vyšly kladné (orientace je kladná, proti směru hodinových ručiček), zjistili jsme, že bod patří do elementu, jež jsme hledali. Ostatní součiny nemají ve všech třech případech stejná znaménka.

Pokud by byl jeden součin roven nule a ostatní pouze kladné či pouze záporné, představuje tato nula pozici bodu na spojnici mezi dvěma body. Jsou-li znaménka u součinu různá, je bod mimo element.

5.2 Nalezení vrstev (elementu) v multielementu

Pro určení vrstev v multielementu se využívá vzájemné polohy bodu a roviny. Naznačení postupu výpočtu:

Předem známe multielement, pro zjednodušení se čtyřmi elementy (vrstvami), a souřadnice hledaného bodu (vrtu). Zavedeme vrcholy multielementu v následujícím tvaru $A_3^0 = [2, 2, 5]$, kde A je označení uzlu, 3 je pořadové číslo uzlu, 0 označuje číslo vrstvy (elementu) a následuje souřadnice uzlu $[x, y, z]$.

$$\begin{array}{lll} A_1^0 = [1, 1, 5] & A_2^0 = [3, 1, 5] & A_3^0 = [2, 2, 5] \\ A_1^1 = [1, 1, 4] & A_2^1 = [3, 1, 4] & A_3^1 = [2, 2, 4] \\ A_1^2 = [1, 1, 3] & A_2^2 = [3, 1, 3] & A_3^2 = [2, 2, 3] \\ A_1^3 = [1, 1, 2] & A_2^3 = [3, 1, 2] & A_3^3 = [2, 2, 2] \\ A_1^4 = [1, 1, 1] & A_2^4 = [3, 1, 1] & A_3^4 = [2, 2, 1] \end{array}$$

Dále x -ové, y -ové a z -ové souřadnice vrtu $R = [2, 1.5, 1.5]$. Způsob otevření vrtu si určíme intervalem hodnot, které představují z -ové souřadnice (2.1, 3.4) označme je $R_{od} = [2, 1.5, 2.1]$ $R_{do} = [2, 1.5, 3.4]$.

Každý element (vrstva) je určen třemi body. Těmito body proložíme rovinu. Do rovnice plochy dosadíme, x a y souřadnice vrtu. Dostaneme hodnotu z na rovině. Tuto hodnotu porovnáme s dolní a horní hranicí otevření vrtu. Podrobný výpočet si ukážeme na nulté vrstvě a ostatní dopočítáme již analogicky.

Tři body popisující nultou vrstvu. $A_1^0 = [1, 1, 5]$ $A_2^0 = [3, 1, 5]$ $A_3^0 = [2, 2, 5]$. Spočtěme si dva vektory, jež popisují plochu.

V_1^0 je vektor v nulté ploše $\overrightarrow{A_1^0 A_2^0}$

V_2^0 je vektor v nulté ploše $\overrightarrow{A_1^0 A_3^0}$

Tedy $V_1^0 = (2 \ 0 \ 0)$ a $V_2^0 = (1 \ 1 \ 0)$. K vektorům V_1^0 a V_2^0 si spočítáme jejich normálu.

$$N^0 = \begin{pmatrix} y(V_{01}) * z(V_{02}) - z(V_{01}) * y(V_{02}); \\ z(V_{01}) * x(V_{02}) - x(V_{01}) * z(V_{02}); \\ x(V_{01}) * y(V_{02}) - y(V_{01}) * x(V_{02}) \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

$$N^0 = (0 * 0 - 0 * 1 \quad 0 * 1 - 2 * 0 \quad 2 * 1 - 0 * 1)$$

$$N^0 = (0 \ 0 \ 2)$$

Z normálového vektoru a souřadnic libovolného bodu spočteme rovnici roviny. Zvolíme si bod A_1^0 .

$$d^0 = -(x(N^0) * x(A_0^1)) - (y(N^0) * y(A_0^1)) - (z(N^0) * z(A_0^1)) \quad (5.5)$$

$$d^0 = -(0 * 1) - (0 * 1) - (2 * 5)$$

$$d^0 = -10$$

Dosaďme d do rovnice roviny.

$$z^0 = \frac{-(x(N^0) * x(R)) - (y(N^0) * y(R)) - d^0}{z(N^0)} \quad (5.6)$$

$$z^0 = \frac{0 - 0 + 10}{2}$$

$$z^0 = 5$$

Jestliže je interval otevření $(2.1, 3.4)$, tak hodnota $z^0 = 5$ do tohoto intervalu nepatří. Následuje další krok výpočtu, který projde následující vrstvou. V ní je $z^1 = 4$, též nepatří do intervalu otevření. Další krok. Zde $z^2 = 3$ avšak trojka spadá do rozmezí intervalu, zjistili jsme, že vrt je otevřen od z^{n-1} plochy, tedy od první vrstvy. Výpočet pokračuje dále $z^3 = 2$, ale už zde dvojka nespadá do intervalu otevření. Výpočet se pozastavuje, aby se určily vrstvy. Poznamenejme si poslední hodnotu plochy; ti.

Mezivýsledek označuje plochy jedna a tři. Všechny vrstvy nacházející se mezi plochami 1 – 3 spadají do intervalu otevření, v našem případě vrstvy první a druhá, budeme-li je číslovat od nuly.

Kapitola 6

Závěry

Závěrem bych chtěl říci, že se mi podařilo vyřešit úlohu, která z počátku nevypadala tak komplikovaně. S vývojem programů se začaly projevovat různé chyby, a to jak v algoritmizaci daného problému, tak i v databázových údajích. Protože jsem se stal průkopníkem v DIAMU, který připravoval data pro kalibraci cenomanského kolektoru, byl jsem vystaven problémům, které jsou spojeny s nasazením matematických modelů v praxi. Program na sestavení okrajových podmínek je vázaný na vrtný katalog, na který byl stanoven požadavek o aktuálnosti a bezchybnosti údajů. Několik málo chyb se z historických důvodů nepodařilo dohledat, bylo nutné vyřešit problém okamžitě, aby nebyly zkreslovány okrajové podmínky. Další problém, jež byl způsoben otevřením vrtu pod spodní hranicí modelové oblasti, byl následně rychle vyřešen. Většina chyb a problémů se v konečné fázi vyřešila a při tak velkém množství vrtů, chyba několika vrtů nezanese velkou nepřesnost do výpočtu.

Ve finální fázi jsem mohl porovnat model z několika pohledů. Pro srovnávání údajů byla vybrána západní část modelu, protože zde jsou čerpací vrty, které mohou být porovnány s modelem. První náhled na kvalitu modelu byl na mapy rozložení koncentrací některých sledovaných látek v modelu a v reálných vrtech. Jak je vidno na mapách, model neobsahuje žádnou velkou chybu, jež by ovlivňovala výpočet. Složení roztoku je rozloženo rovnoměrně, bez velkých diferencí, trochu větší rozdíly vznikají na jižní části oblasti, kde jsou pouze liftové vrty, z nich není známa chemická analýza pro každý vrt, nýbrž pro celé vyluhovací pole. Zvyšování koncentrací probíhá od západu k centru, což je kvalitativně v souladu s modelem i reálnými údaji. Avšak kvantitativně je model poněkud podhodnocen, což má přímou vazbu na počáteční a okrajové podmínky. Okrajové podmínky by měly být správné, avšak po doplnění všech chybějících údajů do katalogu vrtů, budou ještě přesnější. Počáteční podmínky byly vytvořeny novou metodou na

nové výpočetní síti, doposud nebyly kalibrovány a na nové síti nebyly doposud provedeny žádné výpočty. Jako další srovnávací údaj posloužilo chemické složení roztoků jednoho vrtu ve dvanácti kalendářních měsících. Z grafu je zřejmé, že modelové koncentrace vrtu jsou okolo 5 % podhodnoceny než skutečné hodnoty.

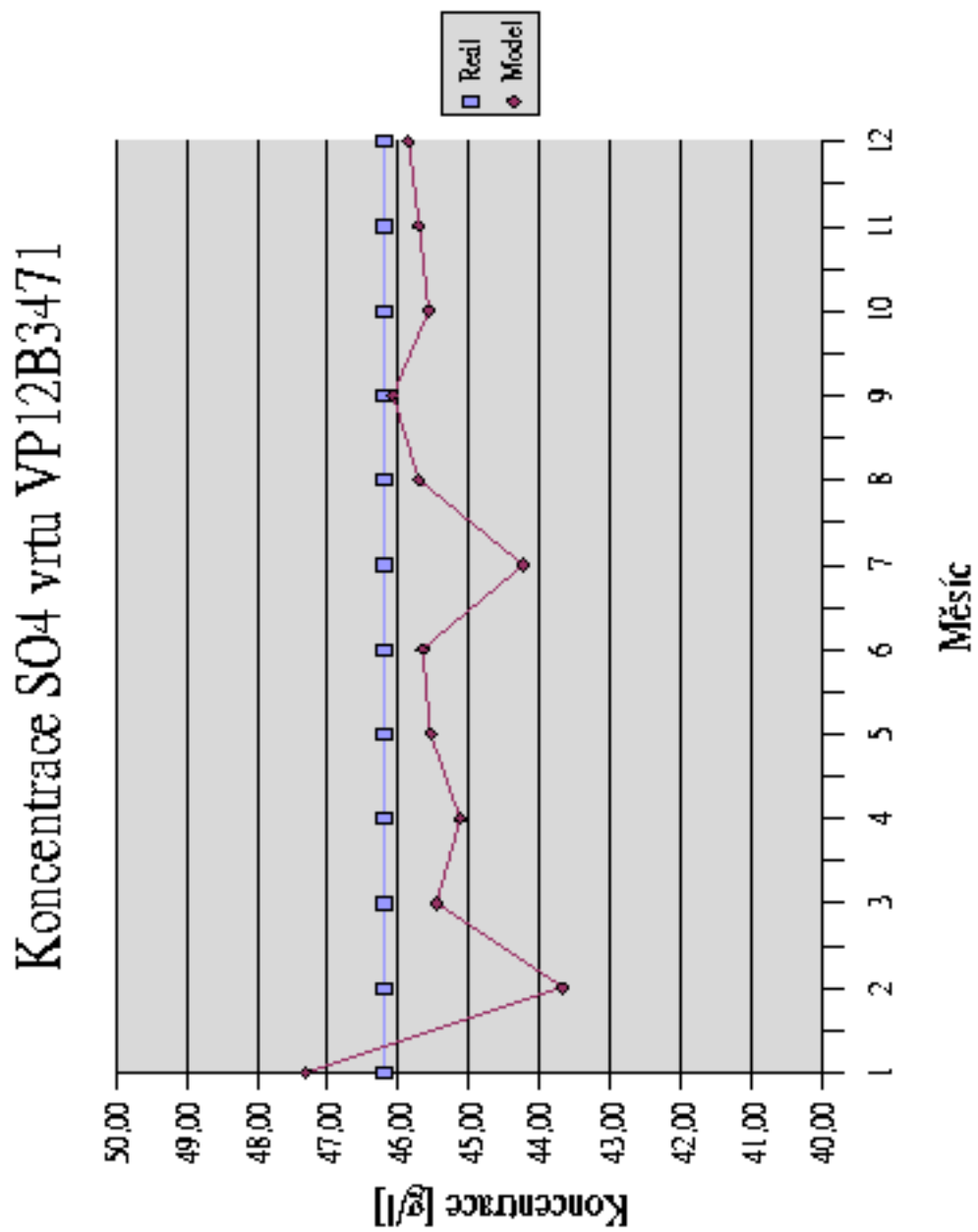
Závěrem bych chtěl říci, že model je mírně podhodnocen a navrhuji změnu počátečních podmínek nebo úpravu materiálového složení elementů. Pro stanovení konkrétních variant a číselných hodnot bude třeba nalést metodiku, jež objasní příčinu podhodnocení modelu. To už nemůže být součástí mé diplomové práce, protože je to otázka na více než jeden rok a složitost by byla spíše na úrovni disertační práce. Dále bych chtěl navrhnout export modelové sítě a katalogových údajů vrtů do databázového serveru, který by urychlil velkou část výpočtu. Toto jsou mé návrhy a záleží pouze na podniku DIAMO, jak se k problematice postaví.

Literatura

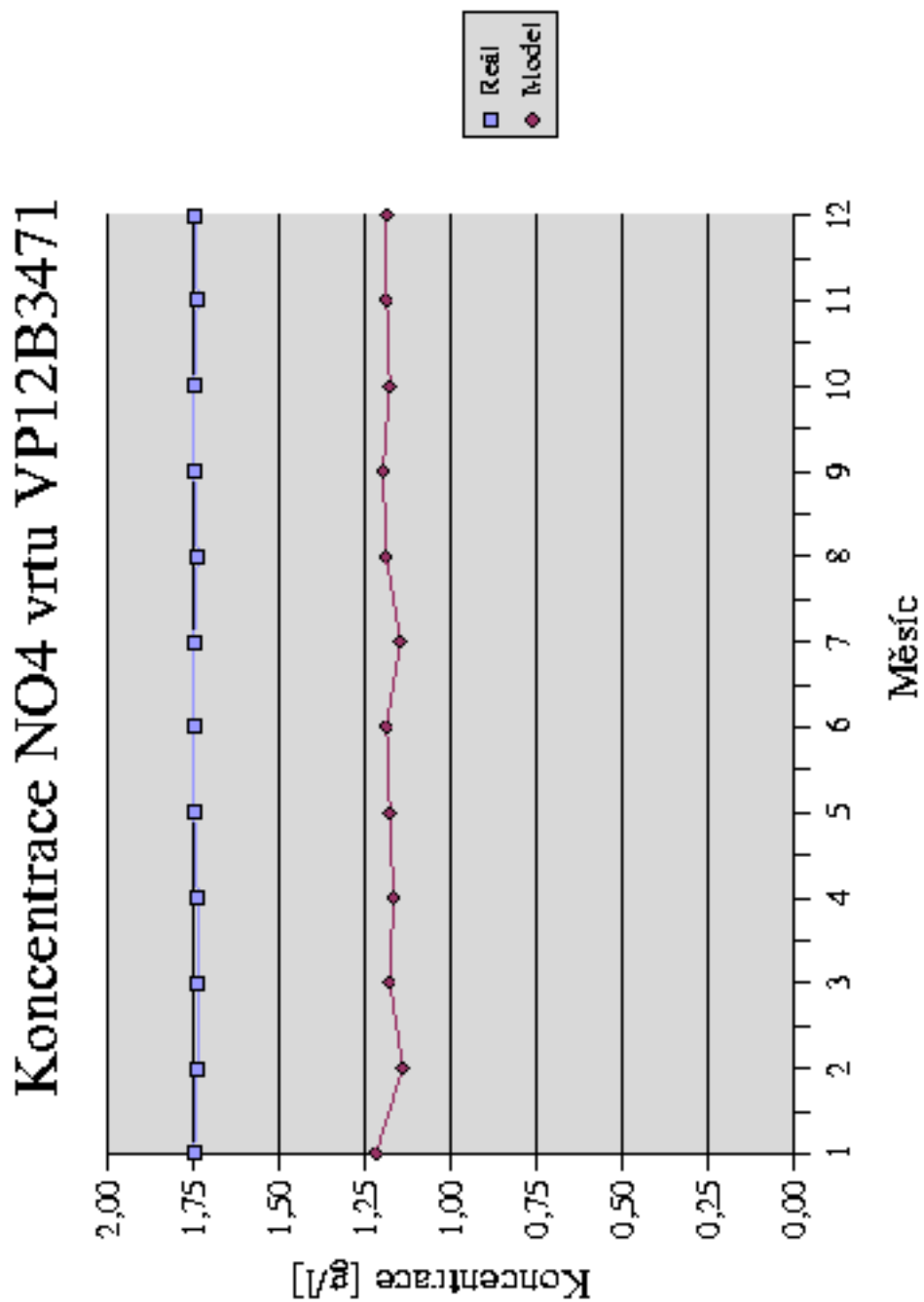
- [1] ZHENG, C., BENNETT, G., D.: *Applied Contaminant Transport Modelling*, Van Nostrand Reinhold: Division of International Thomson Publishing Inc., New York, 1995
- [2] NOVÁK, J., SMETANA, R.: *Modelling of restoration after ISL in the Stráž deposit*, IN: Technical Committee Meeting IAEA on Computer application in uranium exploration, AustriaIn, Vienna, 1994
- [3] NOVÁK, J.: *Groundwater Remediation in the Straz Leaching Operation*, IN: Tagungsband Internationale Konferenz Wismut 2000 – Bergbausanierung in Schlema, Germany, 2000
- [4] AREHARD, HULSTON: *Water-Rock Interaction*, Rotterdam: Balkema, 1998. ISBN 90-5410-942-4, str. 989-992
- [5] NOVÁK, J., MUŽÁK, J., KOLÁŘ, P.: *Řízení sanace horninového prostředí po chemické těžbě uranu na ložisku Stráž*, IN: Sborník Symposia Hornická Příbram ve vědě a technice, Příbram, 2001
- [6] NOVÁK, J., MUŽÁK, J., KOLÁŘ, P.: *Metodika modelových řešení sanace podzemních vod na ložisku Stráž*, Archiv DIAMO s.p., Stráž pod Ralskem.
- [7] KOLÁŘ, V., NĚMEC, I., KANICKÝ, V.: *FEM Principy a praxe metody konečných prvků*, Praha: Computer Press, 1997. ISBN 80-7226-021-9.
- [8] Prezentace DIAMO s.p. na CD-ROM. Stráž pod Ralskem, 2000.
- [9] Ukázkový CD-ROM s modely, Stráž pod Ralskem, DIAMO s.p., 2000.
- [10] Roční zpráva DIAMO s.p., Stráž pod Ralskem, DIAMO s.p., 2000.

Dodatek A

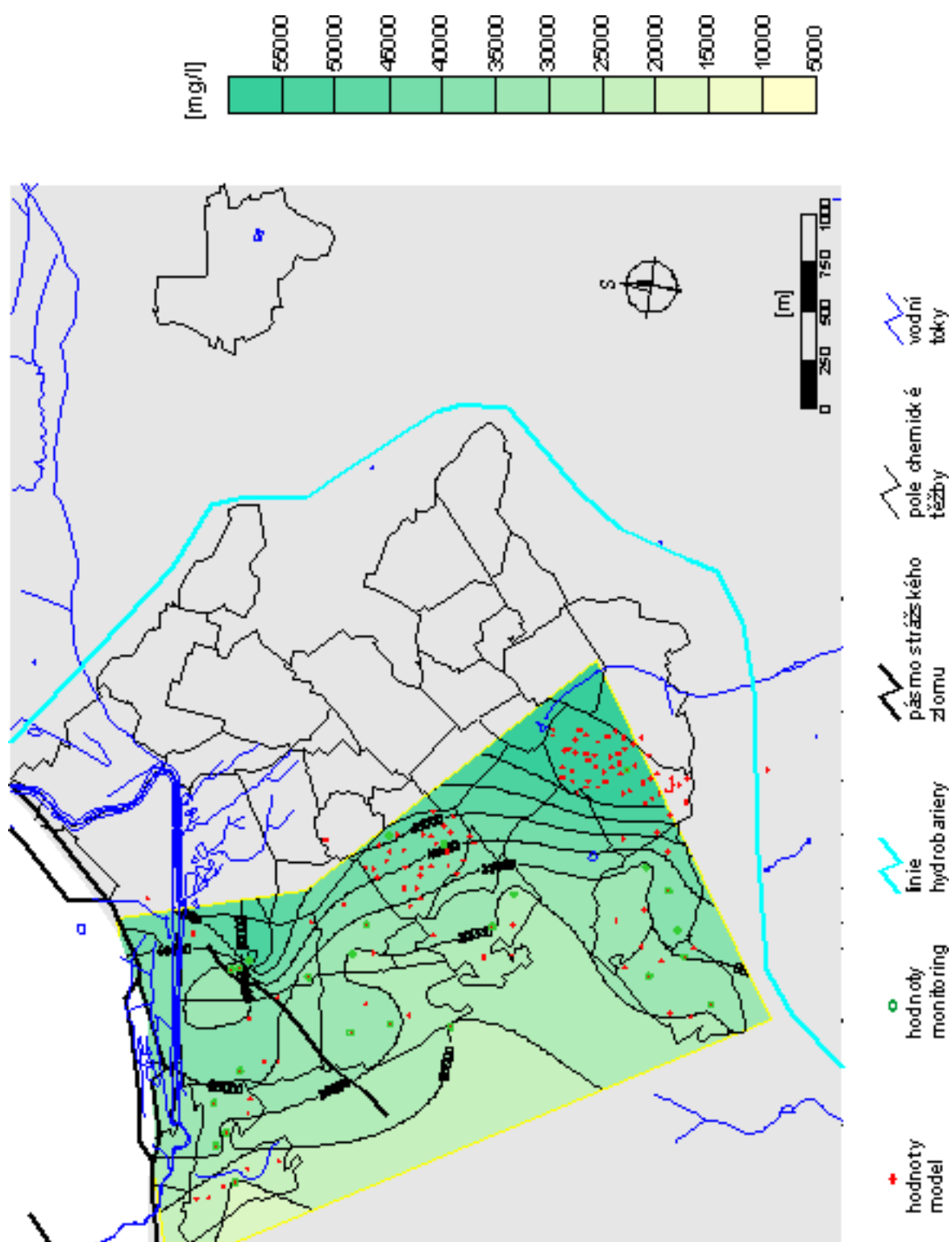
Grafické výsledky



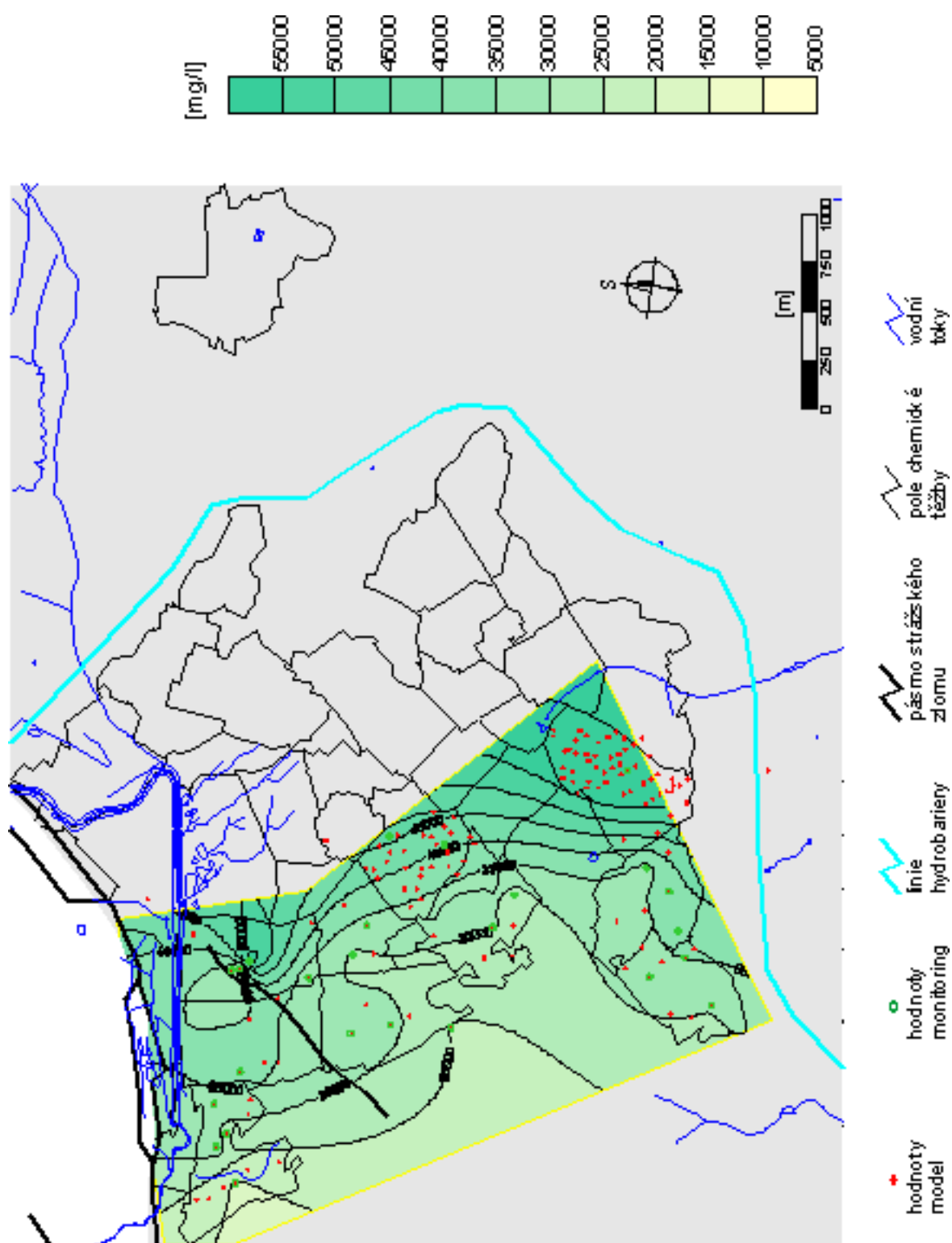
Obrázek A.1: Sledovaná reálná a modelová koncentrace SO₄ vrtu VP12B3471 v roce 1999



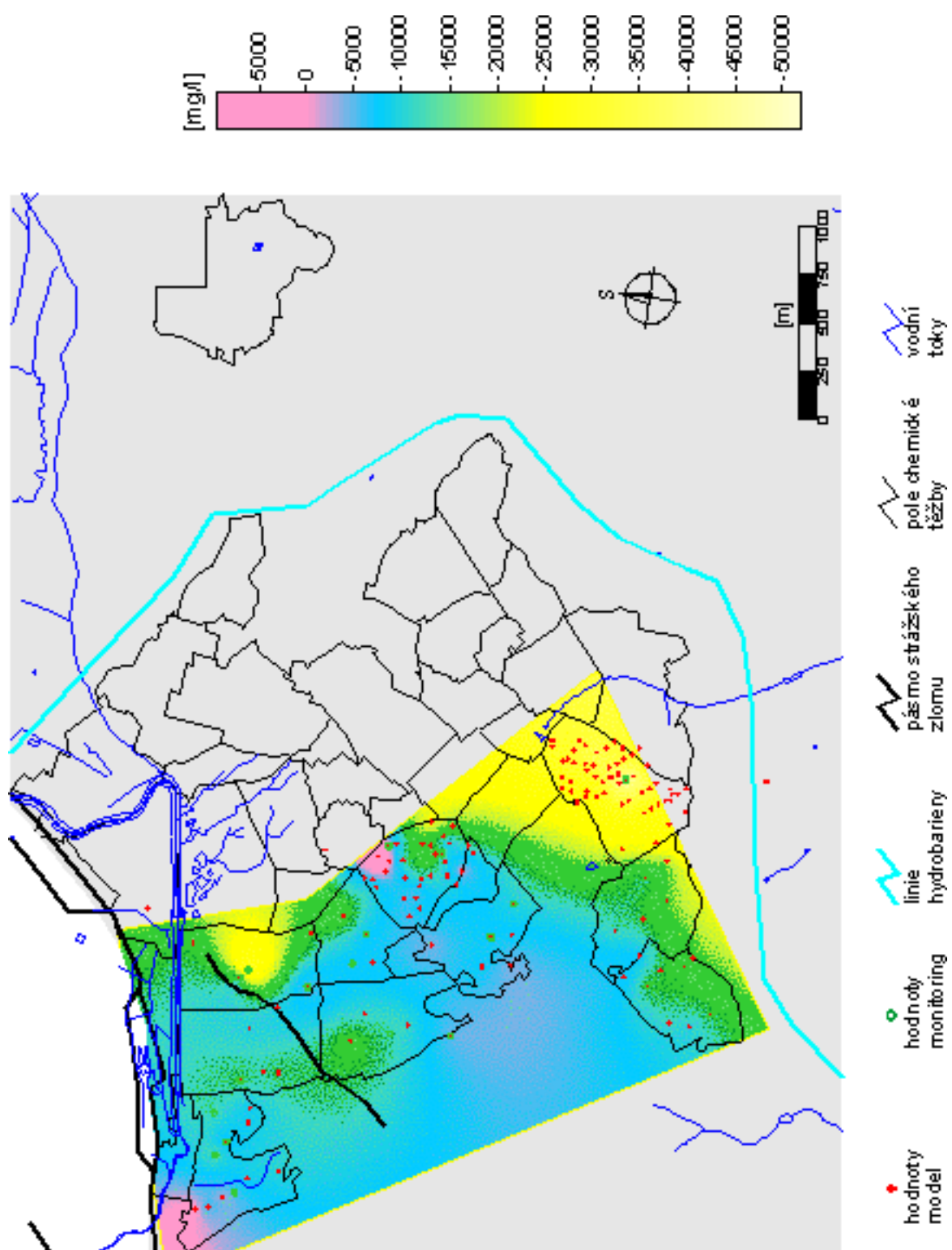
Obrázek A.2: Sledovaná reálná a modelová koncentrace NH_4 vrtu VP12B3471 v roce 1999



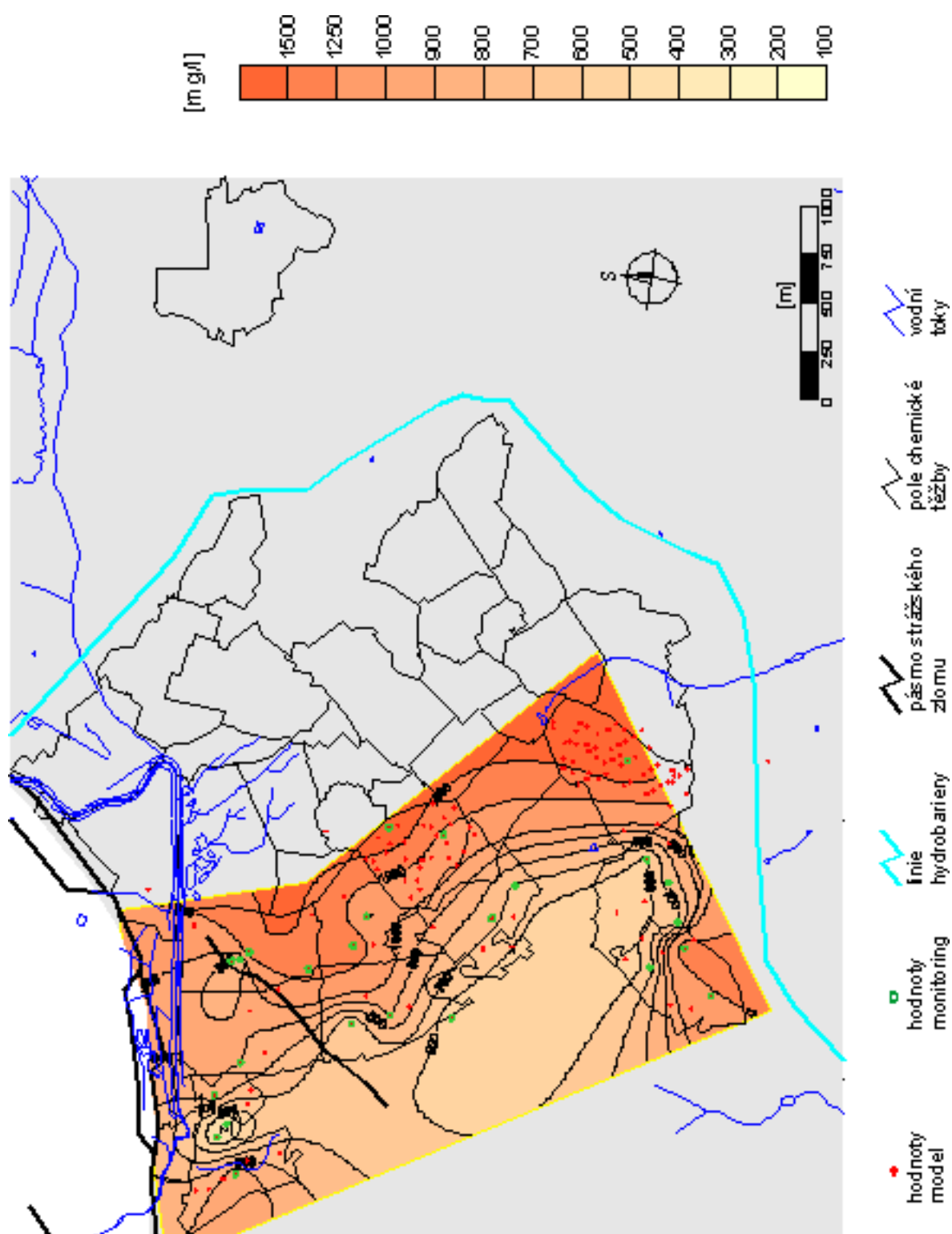
Obrázek A.3: Mapa modelových koncentrací SO_4 sledované oblasti



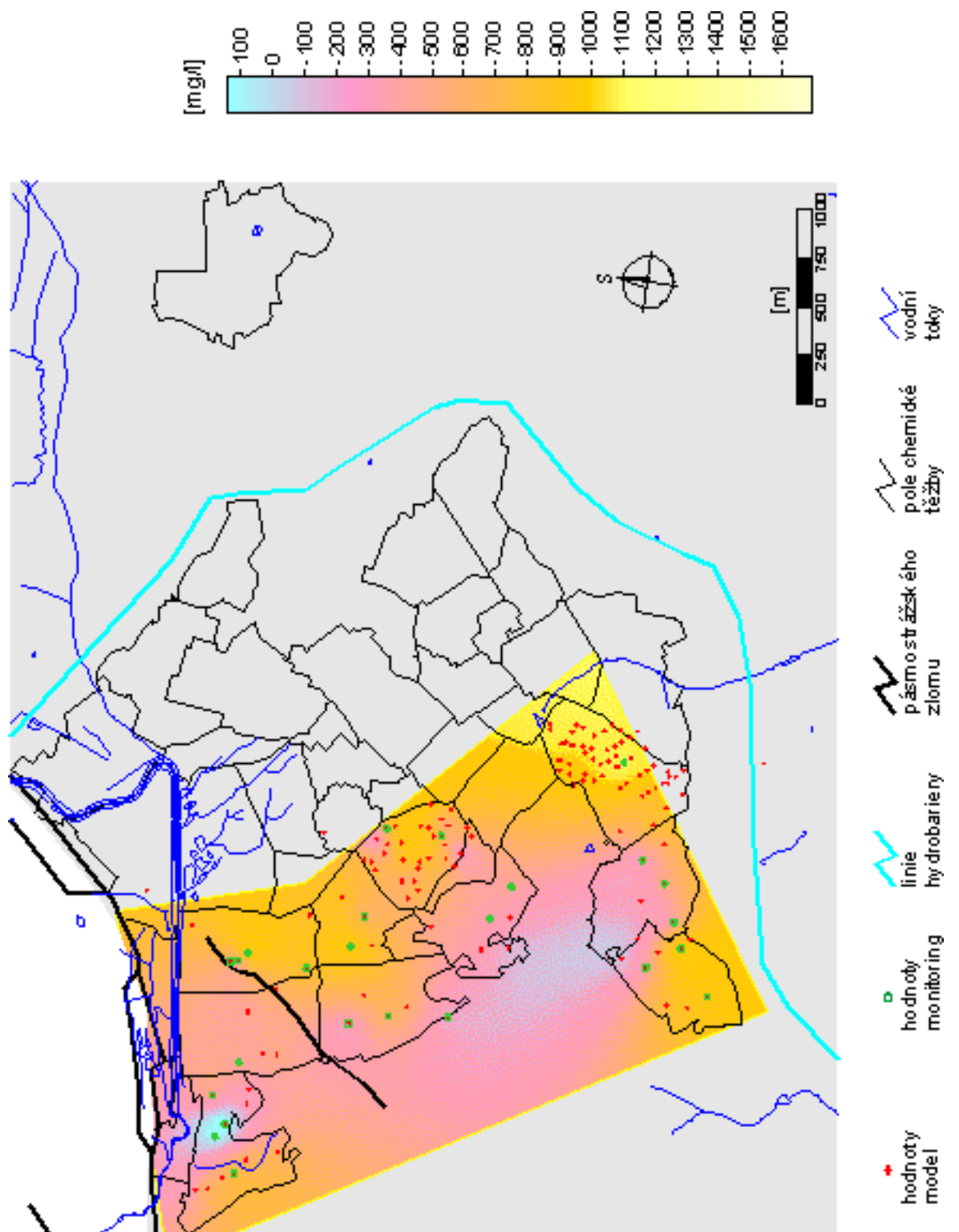
Obrázek A.4: Mapa reálných koncentrací SO₄ sledované oblasti



Obrázek A.5: Mapa rozdílů koncentrací SO_4 sledované oblasti



Obrázek A.7: Mapa reálných koncentrací NH_4 sledované oblasti



Obrázek A.8: Mapa rozdílových koncentrací NH_4 sledované oblasti