

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
FAKULTA MECHATRONIKY A MEZIOBOROVÝCH INŽENÝRSKÝCH STUDIÍ

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

**Porovnání standardních a kombinovaných přístupů
k modelování hydrogeologických procesů v puklinovém
prostředí.**

Rozsah práce:

Počet stránek: 73
Počet příloh: 1 CD

Autor: Martin Obst
Vedoucí bakalářské práce: Ing. Otto Severýn, PhD.

Konzultant: Ing. David Tondr
TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Katedra: KMO

Akademický rok: 2006/2007

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Jméno a příjmení: **Martin Obst**
studijní program: B 2612 – Elektrotechnika a informatika
obor: 2612R011 - Elektronické informační a řídicí systémy

Vedoucí katedry Vám ve smyslu zákona o vysokých školách č.111/1998 Sb. určuje tuto bakalářskou práci:

Název tématu: **Porovnání standardních a kombinovaných přístupů k modelování hydrogeologických procesů v puklinovém prostředí.**

Zásady pro vypracování:

1. Seznamte se s numerickými modely proudění podzemních vod a transportu látek vyvíjenými na KMO a s používanými preprocesory a postprocesory. Dále se seznamte s přístupy k modelování procesů v puklinovém prostředí – diskrétní puklinové síť, ekvivalentní porézní médium a jejich kombinace.
2. Navrhněte a realizujte testovací vhodné úlohy pro porovnání tří výše uvedených přístupů. Testujte vždy několik variant téže úlohy lišících se v hustotě sítě, metodice stanovení ekvivalentní propustnosti apod.
3. Proveďte vyhodnocení výsledků testů z bodu 2, v případě nejasných či sporných výsledků některých z testů proveďte další experimenty pro prověření těchto případů.
4. Na základě výsledků získaných v bodech 2 a 3 proveďte porovnání přístupů k modelování procesů v puklinovém prostředí a navrhněte kvantitativní kritéria vhodnosti nasazení těchto přístupů.
5. Dosažené poznatky a výsledky zdokumentujte ve formě technické zprávy.

Rozsah grafických prací: dle potřeby dokumentace
Rozsah průvodní zprávy: cca 40 stran

Seznam odborné literatury:

- [1] Maryška J., Severýn O., Tauchman M., Tondr D. 2005: Modelling of the groundwater flow in fractured rock – a new approach, In Proceedings of Algoritmy 2005 (K. Mikula, ed.), Slovak Technical University, Bratislava, pp.113-122
- [3] Bear, J., Tsang, C.-F. & De Marsily, G. 1993. Modelling Flow and Contaminant Transport in Fractured Rocks, USA: Academic Press, Inc.

Vedoucí bakalářské práce: Ing. Otto Severýn, PhD.
Konzultant: Ing. David Tondr

Zadání bakalářské práce:
Termín odevzdání bakalářské práce: **18. 5. 2007**

L.S.

.....
Vedoucí katedry

.....
Děkan

V Liberci dne

Prohlášení

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

Beru na vědomí, že Technická Univerzita v Liberci (TUL) má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé bakalářské práce a prohlašuji, že **s o u h l a s í m** s případným užitím mé bakalářské práce (prodej, zapůjčení apod.).

Jsem si vědom toho, že užít své bakalářské práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou na vytvoření díla (až do jejich skutečné výše).

Bakalářskou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím bakalářské práce a konzultantem.

V Liberci: 18. května 2007

.....

Poděkování:

Na tomto místě bych rád poděkoval především vedoucímu mé bakalářské práce panu Ing. Ottu Severýnovi, Ph.D. za jeho odbornou pomoc, poskytnuté informace a cenné rady.

V neposlední řadě bych chtěl poděkovat svým rodičům za podporu, bez které by tato práce nemohla vzniknout.

Děkuji

Anotace

Cílem této bakalářské práce bylo porovnání standardních a kombinovaných přístupů k modelování hydrogeologických procesů v puklinovém prostředí. Přesněji třech přístupů k této problematice a to ryze puklinový přístup, dále pak náhrada porézním médiem a kombinovaný přístup.

Metodika testů spočívá v návrhu testovacích úloh, vytvoření testovacích sítí pomocí programu GMSH, definice příslušných okrajových podmínek, propustností a podmínek pro transport látek. V modelech představují 1D elementy pukliny a porézní část je tvořena 2D trojúhelníkové elementy. Dále pak výpočet testovacích úloh pomocí programu Flow123d, který je vyvíjen na Katedře modelování procesů (KMO).

Abstract

The main aim of this work was a comparison of standard and mixed approaches of hydrogeological process modeling in fractured environment. Detailed three approaches in this area using: 1st – splitting, 2nd - compensation of porous medium, 3rd – mixed method. Methodology of these tests focused on the proposal of testing methods, creation of testing structures using GMSH software, boundary condition definitions, transmittance and conditions for substance transport.

Models of "fracturets elements are presented in 1D elements, the porous part are created using 2D triangles elements. Calculations of testing steps were done in Flow123d software which is developing on the Modeling Processes Institute (KMO).

OBSAH:

Seznam obrázků.....	8
1. Úvod.....	10
2. Charakteristika puklinového prostředí.....	11
3. Modelování puklinového prostředí a procesů v něm probíhajících.....	12
3.1. Ryze puklinový přístup založený na diskrétní puklinové síti.....	12
3.2. Náhrada puklinového prostředí porézním o stejných vlastnostech.....	13
3.3. Kombinovaný přístup.....	13
4. Formulace úloh proudění a transportu.....	14
4.1. Darcyho zákon.....	14
4.2. Rovnice kontinuity.....	15
4.3. Okrajové podmínky.....	15
4.3.1. Dirichletova okrajová podmínka.....	15
4.3.2. Neumannova okrajová podmínka.....	16
4.3.3. Newtonova okrajová podmínka.....	16
4.4. Formulace úloh transportu.....	16
4.5. Metoda konečných prvků.....	17
4.6. Metoda konečných objemů.....	17
5. Popis použitých programů a souborů.....	18
5.1. Gmsh.....	18
5.2. Flow123D.....	19
5.3. Popis používaných souborů.....	20
5.3.1. Formát .INI souboru.....	20
5.3.2 Formát materiálového souboru .MTR.....	21
5.3.3. Formát souboru okrajových podmínek proudění .BCD.....	22
5.3.4. Soubor pro podmínky transportu .BCD.....	23
5.3.5. Soubor počáteční koncentrace objektu ICD.....	23
5.3.6. Formát Gmsh post souboru .POS.....	24
6. První testovací úloha.....	25
6.1. Ryze puklinový přístup.....	26
6.2. Náhrada porézním médiem.....	28
6.3. Kombinovaný přístup.....	31
6.4. Vyhodnocení výsledků prvního testu.....	34
7. Druhá testovací úloha.....	37

7.1. Ryze puklinový přístup.....	37
7.2. Kombinovaný přístup.....	41
7.3. Náhrada porézním médiem.....	45
7.4. Vyhodnocení výsledků druhého testu.....	50
8. Třetí testovací úloha.....	53
8.1. Ryze puklinový přístup v horizontálním a vertikálním směru proudění.....	53
8.2. Náhrada porézním médiem v horizontálním a vertikálním směru proudění.....	62
8.3. Vyhodnocení výsledků třetího testu.....	68
9. Závěr.....	71
Použitá literatura.....	73

SEZNAM OBRÁZKŮ:

Obr. 5-1 Ukázka UGI programu Gmsh	18
Obr. 6-1 Ukázka sítě ryze prvního testu	26
Obr. 6-2 Ukázka umístění okrajových podmínek prvního testu	26
Obr. 6-3 Umístění podmínek pro transport a počáteční koncentrace prvního testu	26
Obr. 6-4 Diagram proudového pole ryze puklinového přístupu	27
Obr. 6-5 Diagram rozložení tlaku v síti ryze puklinového přístupu	27
Obr. 6-6 Snímky transportu látky ryze puklinového přístupu	27
Obr. 6-7. Grafy průběhů koncentrace u ryze puklinového přístupu	28
Obr. 6-8 Síť náhrady porézním materiálem u prvního testu	28
Obr. 6-9 Umístění okrajových podmínek u náhrady porézním médiem	29
Obr. 6-10 Umístění podmínek transportu u náhrady porézním médiem	29
Obr. 6-11 Diagram proudového pole u náhrady porézním médiem	29
Obr. 6-12 Diagram rozložení tlaku v síti u náhrady porézním médiem	29
Obr. 6-13 Snímky transportu látky, porézního přístupu.	30
Obr. 6-14 Grafy průběhu nárůstu koncentrací u náhrady porézním médiem	31
Obr. 6-15 Síť pro kombinovaný přístup v prvního testu	31
Obr. 6-16 Zobrazení okrajových podmínek u kombinovaného přístupu	32
Obr. 6-17 Zobrazení podmínek transportu u kombinovaného přístupu	32
Obr. 6-18-1 Diagram proudového pole u kombinovaného přístupu	33
Obr. 6-18-2 Diagram proudového pole u kombinovaného přístupu	33
Obr. 6-19 Diagram rozložení tlaku v síti u kombinovaného přístupu	33
Obr. 6-20 Ukázkové snímky diagramu transportu látky v kombinovaném modelu	33
Obr. 6-21 Grafy průběhů koncentrací u kombinovaného přístupu	34
Obr. 6-22 Grafy porovnání průběhů koncentrací jednotlivých přístupů	35
Obr. 7-1 Ukázka sítě ryze puklinového modelu u druhého testu	37
Obr. 7-2 Ukázka umístění okrajových podmínek a definovaných materiálů	38
Obr. 7-3 Ukázka umístění podmínek transportu a počáteční koncentrace v síti	38
Obr. 7-4-1 Diagram proudového pole ryze puklinového přístupu (0 až 0,2)	39
Obr. 7-4-2 Diagram proudového pole ryze puklinového přístupu (2 až 3)	39
Obr. 7-4-3 Diagram proudového pole ryze puklinového přístupu (27,5 až 28,5)	39
Obr. 7-5 Diagram rozložení tlaku v síti ryze puklinového přístupu	39
Obr. 7-6 Ukázkové snímky transportu látky pro ryze puklinový model	40
Obr. 7-7 Grafy průběhů koncentrací v elementech ryze puklinového přístupu	41
Obr. 7-8 Síť kombinovaného přístupu v druhém testu	41
Obr. 7-9 Umístění okrajových podmínek a definovaných materiálů	42
Obr. 7-10 Umístění podmínek pro transport a počáteční koncentrace	42
Obr. 7-11-1 Diagram proudového pole kombinovaného přístupu (0 až 4)	43
Obr. 7-11-2 Diagram proudového pole kombinovaného přístupu (25,5 až 28,5)	43
Obr. 7-12 Diagram rozložení tlaku v síti u kombinovaného přístupu	43
Obr. 7-12 Ukázkové snímky transportu látky pro kombinovaný model.	44
Obr. 7-13 Grafy průběhu nárůstu koncentrací v kombinovaném modelu	45
Obr. 7-14 Síť pro model náhrady porézním médiem u druhého testu	46
Obr. 7-15 Zobrazení umístění okrajových podmínek a definovaných materiálů	47
Obr. 7-16 Zobrazení podmínek transportu a počáteční koncentrace	47
Obr. 7-17-1 Diagram proudového pole pro hodnoty 0 až 2	47
Obr. 7-17-2 Diagram proudového pole pro hodnoty 12 až 24	47
Obr. 7-18 Diagram rozložení tlaku v síti	48
Obr. 7-19 Ukázkové snímky diagramu transportu látky pro porézní model	49

Obr. 7-20 Grafy průběhů koncentrací v elementech u porézního média	50
Obr. 7-21 Grafy porovnání průběhů koncentrací jednotlivých přístupů (test druhý)	51
Obr. 8-1 Ukázka sítě pro ryze puklinový přístup ve třetím testu	53
Obr. 8-2 Ukázka umístění okrajových podmínek	54
Obr. 8-3 Ukázka umístění podmínek pro transport a počáteční koncentrace v síti	54
Obr. 8-4 Diagram rozložení tlaků v síti pro horizontální směr toku	56
Obr. 8-5 Diagram proudového pole pro horizontální směr toku	56
Obr. 8-6 Diagram rozložení tlaků v síti pro vertikální směr toku.	57
Obr. 8-7-1 Diagramy proudového pole pro vertikální směr	57
Obr. 8-7-2 Diagramy proudového pole pro vertikální směr	58
Obr. 8-8 Ukázkové snímky transportu látky, v horizontálním směru toku	59
Obr. 8-9 Ukázkové snímky transportu látky, v vertikálním směru toku	60
Obr. 8-10 Grafy průběhu koncentrace pro horizontální směr toku	61
Obr. 8-11 Grafy průběhu koncentrace, pro vertikální směr toku.	61
Obr. 8-12 Použité sítě pro náhradu porézním médiem ve třetím testu	62
Obr. 8-13-1 Umístění okrajových podmínek, podmínek, horizontální směr	63
Obr. 8-13-2 Umístění okrajových podmínek, podmínek transportu, vertikální směr	63
Obr. 8-14-1 Diagram rozložení tlaků v síti a diagram proudového pole (horizontální)	64
Obr. 8-14-2 Diagram rozložení tlaků v síti a diagram proudového pole (vertikální)	64
Obr. 8-15-1 Ukázkové snímky průběhu transportu pro horizontální směr toku.	65
Obr. 8-15-2 Ukázkové snímky průběhu transportu pro horizontální směr toku	66
Obr. 8-16-1 Průběh koncentrace pro horizontální směr toku	67
Obr. 8-16-2 Průběh koncentrace pro vertikální směr toku	68
Obr. 8-17 Grafy porovnání průběhů koncentrací jednotlivých přístupů (horizontální)	68
Obr. 8-18 Grafy porovnání průběhů koncentrací jednotlivých přístupů (vertikální)	69

1. Úvod

Kompaktní horninové masivy s malou propustností, jsou v dnešní době vyhledávány pro výstavbu úložišť nebezpečných látek, ať už se jedná o odpad z chemického průmyslu nebo o vyhořelé palivo z jaderných elektráren. V těchto horninových masivech dochází k proudění kapalin a šíření látek převážně puklinovými systémy obsaženými v masivech. V těchto puklinových systémech se může transportovaná látka šířit na velké vzdálenosti. Projektování a stavba úložišť je velice nákladnou investicí, proto je nutné provádět geologické průzkumy prostředí, do kterého má být stavba situována. Tím je možno předejít při haváriích a únicích nebezpečných látek do okolí větším ekologickým škodám.

Protože vlastní geologické průzkumy jsou velmi nákladnou záležitostí, je již v dnešní době možné náklady minimalizovat prováděním simulací na numerických modelech v počítači. Na numerických modelech je možné testovat proudění, transport látek a dalších procesů, které se mohou vyskytnout ve zkoumaných oblastech. Vypovídací hodnota získaných dat je postačující pro zvážení vhodnosti umístění stavby tohoto prostředí.

Modelování puklinového prostředí a procesů s ním spojených lze rozdělit do několika kroků:

- Měření na reálných geologických objektech
- Příprava získaných dat pro modelování
- Tvorba počítačového modelu reprezentujícího reálné puklinové prostředí
- Výpočet úloh proudění a transportu látek
- Kalibrace a verifikace modelů
- Zobrazení, vizualizace a zhodnocení výsledků
- Stanovení mezí použitelnosti modelů

Úkolem Bakalářská práce je seznámit se s numerickým modelem proudění podzemních vod a transportu látek v puklinovém prostředí. Model je na NTI (Ústav nových technologií a aplikované informatiky). Dále se seznámíme s jednotlivými přístupy k modelování procesů a s vytvořením testů pro jejich porovnání.

Těmito přístupy jsou:

- ryze puklinový přístup
- náhrada porézním médiem o stejných vlastnostech
- kombinovaný přístup

2. Charakteristika puklinového prostředí

S prouděním v puklinových systémech se většinou setkáváme v tak zvaném horninovém masivu. Horninovými masivy jsou myšleny horninová tělesa v přírodním stavu, jejichž celistvost je narušena diskontinuitami. Mezi diskontinuitní poruchy řadíme nejen pukliny, ale také zlomové poruchy, břídlíčnatost, plochy nespojitosti a vrstevnatosti.

Puklinové systémy vznikají deformací horninových masivů při chladnutí magmatu nebo důsledkem tektonických poruch. Charakter deformace závisí především na původní napjatosti, mechanických vlastnostech horniny vůči deformaci a na její intenzitě. Zjednodušeně můžeme rozlišit deformace plastické, během nichž není porušena celistvost horninového komplexu a deformace rupturní, při nichž vznikají nové diskontinuity v masivu (pukliny, kliváž, zlomy).

Puklina horninového masivu je termín pro mechanické diskontinuity v horninách, podél nich nedošlo k nápadnějším pohybům sousedních bloků a na rozdíl od zlomů mají menší rozsah. Stěny pukliny zůstávají buď sevřeny, nebo mohou být i otevřené a následně vyplněné minerály. Velikosti jednotlivých puklin jsou náhodné. Podle vztahu vzniku pukliny a geologického tělesa je možné rozlišit pukliny na primární a sekundární.

Pukliny primární:

Vznikají hlavně objemovými změnami tělesa při jeho vzniku. Například kontrakční pukliny vznikají při chladnutí magmatických těles.

Sekundární pukliny:

Souvisejí s pozdějšími tektonickými pochody. Ty se podle orientace ke směru hlavního napětí mohou podobně jako zlomy dělit na pukliny tahové, tlakové a smykové. Pukliny stejné orientace v horninovém masivu se označují jako pukliny systémové.

Celkové porušení masivů diskontinuitami (pukliny, zlomy, vrstevnatost, břídlíčnatost) významně ovlivňuje jeho celkové fyzikálně mechanické parametry, a tím i podmínky zakládání staveb.

3. Modelování puklinového prostředí a procesů v něm probíhajících

Modelování proudění v puklinových systémech a transport látek je relativně novým směrem výzkumu zabývajícím se oblastí hydrogeologických dějů. Není dán jednotný fyzikální přístup k této problematice, a proto nejsou přesně definována kritéria, jak tyto jevy namodelovat.

Obecně lze k řešení problematiky proudění a transportu látek v puklinových systémech přistoupit třemi metodami. A však výsledný model puklinového prostředí je výsledkem propojením modelů s využitím všech tří metod. Z důvodu, že pro různé části se jeví výhodnější použít určitou metodu.

Typy přístupu k modelování jsou:

- Ryze puklinový přístup založený na diskretní puklinové síti.
- Náhrada puklinového prostředí porézním o stejných vlastnostech
- Kombinace předchozích metod.

3.1. Ryze puklinový přístup založený na diskretní puklinové síti

U ryze puklinového přístupu je snaha o co nejpřesnější zobrazení procesů ve zkoumané oblasti. Síť je vytvořena z dat, které jsou získány z průzkumu dané oblasti. Mezi informace, které je potřeba o zkoumané oblasti získat, aby bylo možné síť vytvořit, patří: počet puklin v oblasti, velikost puklin v dané oblasti, hloubce výskytu puklin a úhlu pod kterým se v masivu pukliny vyskytují. Tyto informace se získávají pomocí sondážních vrtů. I přes velkou snahu získaná data nepopisují zcela zkoumanou oblast, z tohoto důvodu vytvořená síť není přesným obrazem reálného puklinového systému. Samotné vytváření diskretní sítě je časově náročné. Další nevýhodou této metody je její velká výpočetní náročností a z toho plynoucí i velké nároky na výpočetní techniku. Důvodem velkých nároků na výpočetní techniku jsou rozsáhlé soustavy rovnic. Dnešní výpočetní technika není na takové vysoké úrovni, která by byla umožňovala použití této metody na výpočet sítí o velikosti větší než desítek metrů. Metoda se dá využívat pro menší zkoumané oblasti nebo pro námi vybrané oblasti, které jsou součástí větších modelů, kde požadujeme přesnější výsledky simulace např. blízké oblasti úložišť a podobně.

Hodnoty výsledků testovacích úloh při použití tohoto modelu k popisu puklinového prostředí jsou statistické povahy, a tudíž musí být pečlivě zhodnoceny a kontrolovány. Kalibrace a verifikace modelu pro danou konkrétní situaci je tedy nezbytnou součástí aplikace modelu.

3.2. Náhrada puklinového prostředí porézním médiem o stejných vlastnostech

Při znalosti ekvivalentních hydraulických parametrů můžeme puklinový model nahradit porézním o stejných vlastnostech. Použití náhrady porézním médiem je použitelné především případech kdy je zapotřebí modelové a transport puklinovým systémem, který leží na rozsáhlé oblasti a zároveň, kdy není zapotřebí znát děje v podoblastech. Tato metoda lze použít za předpokladu, že modelovaná oblast obsahuje velkou hustotu puklin. Vlastnosti takovéto puklinové oblasti se blíží vlastnostem tvořené porézními horninami. Z matematického hlediska existuje jediný požadavek a tím je možnost určení tzv. Reprezentativního elementárního objemu, v němž jsou všechny pukliny navzájem propojené. Zkoumáním tohoto přístupu se zabývá tato práce. Nevýhodou využití tohoto přístupu je nahrazení oblastí s heterogenními vlastnostmi prostředí, porézní náhradou homogenními vlastnostmi.

3.3. Kombinovaný přístup

Hlavním důvodem použití těchto metod je spojení výhod předchozích přístupů k modelování procesů v puklinového prostředí.

Ryze puklinové modely nám nestačí zejména z důvodu náročnosti výpočtů, neúplných dat o dané oblasti a pracné přípravy sítí, je použití ryze puklinového přístupu omezeno na oblasti o rozměrech řádu metrů až desítek metrů. U náhrady porézním médiem můžeme aplikovat procesy na velké oblasti, ale na úkor ztráty detailnějších informací, které se v dané oblasti dějí. Oblast s heterogenními vlastnostmi je zde nahrazena porézním materiálem s homogenními vlastnostmi. Proto pro případ, kdy je zapotřebí modelovat procesy na větší oblasti a zároveň, nechceme-li ztratit některé cenné informace. Jako vhodné se zde jeví použít kombinovaný model.

Jednou z možností je použití modelu porézního prostředí, jehož parametry budou nastaveny na základě zkoumání menších útvarů reprezentovaných simulací na diskrétní puklinové síti. Další možností je snaha se nahradit méně významné oblasti puklin, které se malou měrou podílejí na proudění, modelem porézním. Pomocí diskrétní puklinové sítě modelujeme jen největší a nejvýznamnější pukliny.

Tyto kombinované modely mají pravděpodobně největší možnosti uplatnění vzhledem k vysokým vypovídajícím schopnostem, přesnosti a relativně akceptovatelné složitosti výpočtů.

4. Popis úloh proudění a transportu

V této kapitole jsou uvedené základní matematické vztahy, které popisují ustálené saturované proudění v puklinovém a porézním prostředí. Konkrétně:

- Darcyho zákon
- Rovnice kontinuity
- Okrajové podmínky

4.1. Darcyho zákon

Tento zákon vyjadřuje závislost rychlostí proudění na propustnosti a tlaku kapaliny. Nejčastěji uváděný tvar je:

$$\vec{u} = -\mathbf{K} \cdot \nabla p \text{ na } \Omega$$

Kde $\vec{u}$ je rychlost proudění. $\mathbf{K}$ tenzor propustnosti napětí. Tenzor v sobě zahrnuje vlastnosti prostředí, jejich průchodnost, drsnost povrchu, dále jsou zahrnuty vlastnosti kapalin (hustota a viskozita) a gravitační zrychlení. Vztah pro puklinovou propustnost $\mathbf{K}$ je:

$$K = \frac{\rho \cdot g \cdot b^2}{\mu \cdot 12}, \quad (4.1)$$

kde b ...je rozevření stěn puklin
 ρ ...je hustota kapalin
 μ ...je dynamická viskozita kapaliny
 g ...je tíhové zrychlení.

Propustnost $\mathbf{K}$ porézního media je dána vztahem:

$$K = \frac{k \cdot \rho \cdot g}{\mu}, \quad (4.2)$$

kde k ...je propustnost, která je závislá jen porézním materiálu
 ρ ...je hustota kapalin
 μ ...je dynamická viskozita kapaliny
 g ...je tíhové zrychlení.

Dále pak p je tlak kapaliny a Hamiltonův operátor ∇ , ten je definován:

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2} \right), \quad (4.3)$$

z toho vyplývá, že výraz ∇p je významu gradientu tlaku kapaliny. Ω je dvourozměrná oblast reprezentující puklinové prostředí.

4.2. Rovnice kontinuity

Někdy také uváděny podnázvem bilanční rovnice. Platí pro stacionární proudění ve tvaru:

$$\nabla \cdot \vec{u} = q \text{ na } \Omega, \quad (4.3)$$

kde $\vec{u}$ je vektorové pole rychlostí, $\nabla \cdot \vec{u}$ má význam divergence vektorového pole rychlosti. Funkce q charakterizuje intenzitu vnitřních zdrojů kapaliny. Z toho plyne, že hodnota q udává, kolik kapaliny zdroj do oblasti dodá nebo odebere za jednotku času. To platí pro místa uvnitř zkoumané oblasti, nikoliv pro hranice oblasti. Jevy na hranicích zkoumané oblasti nám popisují okrajové podmínky popsané níže.

Podmínkou použití takto zjednodušeného popisu proudění musí puklinové prostředí splňovat:

- Tok kapaliny může být max. v řádech m/den.
- Velikost rozevření pukliny je zanedbatelný, vzhledem k ostatním rozměrům puklin.

4.3. Okrajové podmínky

V této části jsou zmíněny podmínky popisující jevy na hranicích oblasti Ω . Hranici oblasti Ω budeme dále označovat jako $\partial\Omega$. Na hranici $\partial\Omega$ můžeme definovat tři typy okrajových podmínek (OKP), a to:

- Dirichletova OKP
- Neumannova OKP
- Newtonova OKP

4.3.1. Dirichletova okrajová podmínka

Jedná se o nejjednodušší z uvedených okrajových podmínek, udává přímo tlak kapaliny na hranici $\partial\Omega_D$.

$$p = p_D \text{ na } \partial\Omega_D, \quad (4.4)$$

kde je p tlak kapaliny a p_D je skalární funkce definující hodnoty tlaku na hranici oblasti $\partial\Omega_D$.

4.3.2. Neumannova okrajová podmínka

Neumannova OKP udává množství kapaliny proteklé přes hranici oblasti za jednotku času. To je vyjádřeno vztahem:

$$\vec{u} \cdot \vec{h} = u_N \text{ na } \partial\Omega_N. \quad (4.5)$$

Zde $\vec{h}$ představuje jednotkový vektor vnější normály křivky tvořící část hranice $\partial\Omega_N$ a u_N je předepsaná hodnota toku přes hranici oblasti. V praxi je obtížné určit přetok přes hranici oblasti, z toho důvodu se často můžeme setkat s homogenní zobrazením Neumannova OKP, která je dána vztahem:

$$\vec{u} \cdot \vec{h} = 0. \quad (4.6)$$

Vyjadřující, že tok přes hranici oblasti je roven nule, což znamená, že na vně hranice se nachází nepropustný materiál.

4.3.3. Newtonova okrajová podmínka

Tato okrajová podmínka je nejsložitější z uvedených podmínek, avšak nejlépe popisuje fyzikální situaci hranici oblasti. Je vyjádřena vztahem:

$$\vec{u} \cdot \vec{h} - \sigma(p - p_D) = u_w \text{ na } \partial\Omega_w. \quad (4.7)$$

Newtonova okrajová podmínka udává průtok přes hranici oblasti $\partial\Omega_w$, který je roven dané hodnotě u_w zvětšené o hodnotu přímo úměrnou tlakovému spádu ($p - p_D$) na této hranici. Koeficient σ představuje koeficient přestupu, který kvantitativně vyjadřuje vlastnosti hranice. Hodnota koeficientu se zjišťuje empiricky.

Podmínkou pro výpočet proudění je, aby alespoň na jedné hraně oblasti byla definovaná Dirichletova OKP.

4.4. Formulace úloh transportu

Transport látky uvnitř jedné pukliny, aproximované plošným útvarem s přiřazeným rozevřením je obecně popsána tzv. konvekční rovnicí. Konvekční rovnice má tvar:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \lambda \nabla \cdot (c \cdot \vec{h}) = q, \quad (4.8)$$

kde c ...koncentrace
 t ...čas
 $\vec{h}$...rychlost
 q ...zdroje

V této rovnici $\nabla \cdot$ označuje operátor divergence vektorové funkce. Člen $\frac{\partial c}{\partial t}$ popisuje vývoj koncentrace látky v čase. Konvekční člen $\lambda \nabla \cdot (c \cdot \vec{u})$ popisuje šíření látky vlivem rychlostního pole, daného Darcyho zákonem, λ je skalární parametr.

Dirichletova okrajová podmínka transportu udává přímo koncentraci látky (kontaminantu) na hranici $\partial\Omega_D$.

$$c = c_D \text{ na } \partial\Omega_D, \quad (4.9)$$

kde c je koncentrace látky a c_D je skalární funkce definující hodnotu koncentrace látky na hranici oblasti $\partial\Omega_D$.

4.5. Metoda konečných prvků (MKP)

Popis úloh proudění vede na soustavu parciálních diferenciálních rovnic. Analytické řešení je velmi obtížné a je známe pouze pro omezenou třídu úloh. Proto se používá aproximace řešení použitím přibližných numerických metod. Obecně se dá rozlišit několik postupů, pomocí kterých lze simulovat proudění kapalin v puklinovém systému nebo v porézním médiu. Jednou z těchto metod je metoda konečných prvků (MKP). Princip MKP spočívá v diskretizaci spojitého kontinua do určitého (konečného) počtu prvků, přičemž zjišťované parametry jsou určovány v jednotlivých uzlových bodech. Diskretizací rozdělíme oblast na malé části, které jsou matematicky snadno popsitelné.

4.6. Metoda konečných objemů (MKO)

Testovaný kombinovaný model Flow123d počítá transport látky pomocí numerické metody konečných objemů. Tato metoda je velmi vhodná pro nelineární a degenerované problémy. Aplikace tzv. upwind techniky je nejjednodušším způsobem zamezení neodůvodněným oscilacím, metoda splňuje bilanci hmoty na každém elementu. Bohužel, u této metody je obtížné zahrnout plný disperzně-difúzní tenzor a metoda klade restriktivní požadavky na podobu sítě.

5. Popis použitých programů a souborů

V této kapitole jsou zmíněny programy, které byly využity při vypracování bakalářské práce. A stručný popis struktury souborů, které zde mají funkci vstupních a výstupních dat.

Použitými programy jsou:

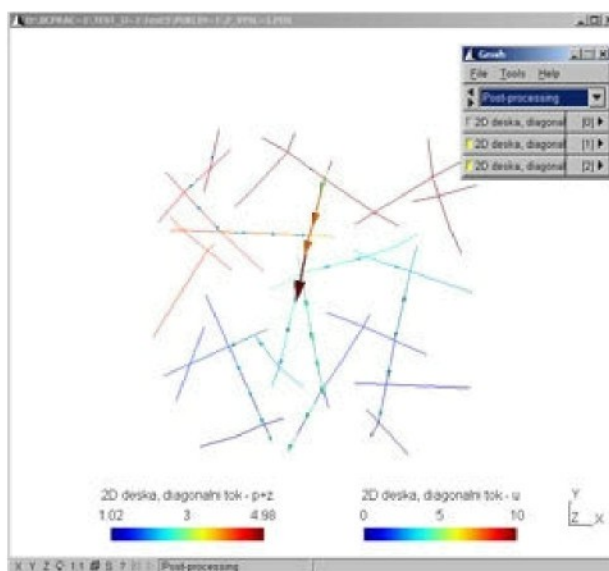
- program Gmsh
- program Flow123D

5.1. Gmsh

Gmsh je konečně prvkový generátor sítě se zabudovaným pre-a post-procesorovými funkcemi. Jednou z velkých předností je schopnost při jednoduchém zadání několika geometrických vlastností modelu vytvořit přizpůsobené liniové, plošné či objemové prvky a zaplnit jimi model a tím vytvořit z modelu síť. Gmsh je poměrně malý program, který je vyvíjený na akademické půdě, pro akademické účely a je volně k použití.

Gmsh je tvořen čtyřmi moduly:

- Geometry – modul pro geometrickou definici entit
- Mesh – modul pro generátor konečně prvkových sítí
- Solver – modul pro připojení externích výpočetní zařízení
- Post-processing – modul pro konečnou vizualizace výsledků



Obr. 5-1 Ukázka UGI programu Gmsh

Všechny moduly lze ovládat buď pomocí grafického uživatelského rozhraní (GUI) nebo pomocí ASCII datových souborů gmsb s využitím vlastního skriptovacího jazyka. Při používání interaktivní akce se generují soubory ve skriptovacím jazyce, to umožňuje automatizovat ošetření, používání smyček a externích systémových volání.

Výhody používání programu Gmsb:

- Přehledné grafické uživatelskému rozhraní
- Vytváří 1D, 2D a 3D konečně prvkové sítě
- Možnost spolupráce s externími řešiči
- Velké možnosti při vizualizaci výsledků
- Export do mnoha formátů (Postskript, PNG, JPG, ...)
- Generování komplexních animací výsledků
- Velké množství konfiguračních možností
- Běží na různých platformách (Windows, Mac, Unix)

Výstupní soubor z Gmsb, který obsahuje informace o vygenerované síti, jsou uloženy v souboru s příponou .msh. Soubor s příponou .pos je vstupní soubor pro program Gmsb, tento soubor slouží k uchování dat výsledku pro vizualizaci. Struktura těchto souborů je popsána níže.

5.2. Flow123D

Program Flow123D zajišťuje samotné simulační výpočty. Jedná se o program pro simulaci proudění a transport látek na kombinovaných sítích.

Vstupními soubory pro program jsou:

- .ini – obsahuje řídící informace pro výpočet
- .msh – obsahuje data o vygenerované síti v programu gmsb
- .ngh – obsahuje informace o sousednostech jednotlivých elementů v síti
- .mtr – obsahuje informaci o definovaných materiálech
- .bcd – soubory s okrajovými podmínkami a podmínkami pro transport
- .icd – obsahuje informace o počátečních koncentracích jednotlivých elementů

Výsledky výpočtu proudění a transportu se ukládají do souborů s příponou pos. Data z tohoto souboru je možné dále vizuálně zpracovat v programu gmsb pro další prezentaci. Program Flow123D má v sobě také zabudovanou funkci pro vygenerování souboru ngh ze

souboru sítě msh. Pro vygenerování je tohoto souboru se musí program flow123d spustit s komentářem-n (př.: flow123d.exe – n *.ini).

5.3. Popis používaných souborů

V této části bych se chtěl uvést strukturu jednotlivých souborů, které je potřeba před výpočtem modelu si připravit (soubory: .ini, .mtr, .bcd, .icd). Nebo soubory, které jsou generovány programy, ale je potřeba se v jejich zápisu orientovat (a to: .msh, .pos) pro další práci např.: získání dat pro tvorbu graf průběhu koncentrace v elementu.

5.3.1. Formát .INI souboru

Jak již bylo zmíněno tento soubor obsahuje řídící informace pro samotné výpočet. Struktura souboru .ini je rozdělena do několika sekcí. Před výpočtem je potřeba tento soubor připravit. Tento soubor slouží jako komentář při spuštění programu flow123d (příklad použití souboru ini: flow123d.exe – s *.ini).

[Global]

V této sekci se udává typ a popis problému. Změnou u poslední verze programu flow123d je, že v této sekci se definuje také položky (stop_time, save_step). Ty byly u předchozích verzí definovány v sekci transport.

[Input]

Zde se uvádějí všechny vstupní soubory, které jsou zapotřebí k výpočtu proudění. Mezi tyto soubory patří: *.msh, *.mtr, *.bcd (soubor s okrajovými podmínkami), *.ngh.

[Transport]

V této sekci se určuje, jestli se má provést výpočet transportu (položka: transport_on). Dále se zde uvádějí soubory nutné pro provedení výpočtu transportu (soubory: *.icd, *.bcd – podmínky pro transport). A také výstupní soubor, do které ho se mají uložit výsledky.

[Run]

Zde se uvádí název log souboru, do kterého se budou ukládat informace o průběhu výpočtu.

[Solver]

Tato sekce je určena pro nastavení řešiče. Zde je zapotřebí uvést cestu k používanému řešiči, v našem případě se uvádí Matlab. Dále se zde definuje, zda se bude řídit průběh výpočtu manuálně. V případě, že ano tak se musí uvést jméno kontrolního souboru. A nakonec se zde musí uvést přesnost řešiče. U všech testovacích úloh je přesnost nastavena na $1e^{-7}$.

[Output]

V této sekci je uvedeno zda se má vytvořit výstupní soubor a jeho název (*.pos). Do tohoto souboru se ukládají výsledky výpočtu tlaku a proudového pole. A také kolik desetinných míst mají mít výsledné hodnoty.

5.3.2 Formát materiálového souboru .MTR

Jedná se také o soubor, který se musí připravovat. Obsahuje definované informace o materiálech, které vstupují do výpočtu a jsou přidruženy jednotlivým fyzikálním částem modelu.

Struktura souboru:

```
$MaterialFormat
1.0 typ-souboru rozsah-dat
$EndMaterialFormat
$Materials
počet-materiálů
index-materiálu typ <typ-specific-dat> [text]
...
$EndMaterials
```

Typ-souboru – jedná se o celočíselnou hodnotu, pokud je rovna 0 je soubor uložen ve formátu ASCII.

Rozsah-dat – je to celočíselná hodnota, která definuje šířku ukládaných dat.

Počet-materiálů (int) – je to celočíselná hodnota definující počet materiálů.

Index-materiálu (int) – celočíselná hodnoty indexující definované materiály.

Typ (int) – celočíselná hodnota definující typ, viz Tab. 5-1.

Typ-specific-data – celočíselná hodnota definující formát materiálu, viz tabulka Tab. 5-1.

Typ	typ-specific-dat	popis
11	k	$K = (k)$
21	k	$K = \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}$
22	$k_x k_y$	$K = \begin{pmatrix} k_x & 0 \\ 0 & k_y \end{pmatrix}$

Tab. 5-1 Typový formát propustností

5.3.3. Formát soubor okrajových podmínek proudění .BCD

V tomto souboru jsou uloženy informace o definovaných okrajových podmínkách.

Struktura souboru:

```

$BoundaryFormat
1.0 typ-souboru rozsah-dat
$EndBoundaryFormat
$BoundaryConditions
počet-podmínek
index-podmínky typ <typ-specific-dat> typ-umístění <formát-umístění>
počet-tags <tags> [text]
...
$EndBoundaryConditions

```

Počet-podmínek (int): udává počet definovaných okrajových podmínek.

Index-podmínky (int): udává číslo definované okrajových podmínek.

Typ definuje typ okrajové podmínky:

Typ = 1 Okrajová podmínka Dirichletova typu.

Typ = 2 Okrajová podmínka Neumannova typu.

Typ = 3 Okrajová podmínka Newtonova typu.

Typ-specific-dat: definuje formát zápisu podmínky viz tabulka 5-2, ten je závislý na typu okrajové podmínky.

typ	typ-specific-dat
1	skalár
2	tok
3	skalár + koeficient sigma

Tab. 5-2

Typ-umístění definuje, ke kterému elementu se okrajová podmínka přiřazuje a způsob přiřazení. Přiřadit podmínku k elementu můžeme třemi způsoby:

- Umístění má hodnotu 1 je podmínka přiřazena na uzele.
- Umístění má hodnotu 2 je podmínka přiřazena na určenou stranu.

- Umístění má hodnotu 3 tato podmínka jde přiřadit jen na elementy, které mají jen jednu externí stranu.

Formát-umístění definuje zápis jednotlivých umístění dle tabulky 5-3.

typ-umístění	formát-umístění
1	index uzle
2	index elementu + strana elementu
3	index elementu

Tab. 5-3

5.3.4 Soubor pro podmínky transportu .BCD

Soubor pro definování podmínek transportu má stejnou příponu, ale struktura souboru je jiná.

Struktura souboru:

```
$Transport_BCDFormat
1.0 typ-souboru rozsah-dat
$EndTransport_BCDFormat
$Transport_BCD
počet-podm-trans
index-podm-trans index-okraj-podm koncentrace
...
$EndTransport_BCD
```

Počet-podm-trans: udává počet definovaných podmínek pro transport.

Index-podm-trans: udává pořadové číslo podmínky.

Index-okraj-podm: zde se musí uvést index okrajové podmínky, ke které bude přiřazena podmínka transportu.

Koncentrace: definuje hodnotu koncentrace.

5.3.5. Soubor počáteční koncentrace objektu .ICD

Tento soubor slouží k nastavení počáteční koncentrace látky v elementech v počítaném souboru.

Struktura souboru:

```
$ConcentrationFormat
1.0 0 8
$EndConcentrationFormat
```

```

$Concentrations
počet-podmínek-koncentrací
index-podmínky index-elementu koncentrace
...
$EndConcentrations

```

Počet-podmínek-koncentrací a index-podmínky mají význam jako u předchozích souborů. Počet definujících podmínek je shodný s počtem elementů v síti. Koncentrace udává hodnotu koncentrace, kterou budou mít elementy na začátku výpočtu.

5.3.6. Formát Gmsh post souboru .POS

Gmsh může číst a psát skupiny dat ve třech různých formátech souboru. V analytickém, ASCII a binárním formátu souboru. Analytický formát je nejstarší a nejvíce flexibilní, ale také má nejpomalejší čtení a zápis. ASCII a binární formáty jsou méně flexibilní, ale je u nich rychlejší čtení a zápis pro větší skupiny dat.

Struktura souboru:

```

View „text“ {
  typ ( seznam souřadnic) { seznam hodnot };
  ...};

```

Typ udává, o jaký typ elementu se jedná a zda se jedná o skalární, vektorovou nebo tensorovou veličinu. Počet souřadnic a hodnot závisí na tom, o jaký typ se jedná. V našem případě jsou výsledky skalárními a vektorovými veličinami na sítích, které se skládají z liniových a trojúhelníkových elementů. Proto ve výsledných post-processorových souborech figurují typy, VP (vektor point), SL (scalar line) a ST (scalar triangle). Pro popis uzlu jsou zapotřebí 3 souřadnice a pro trojúhelníkové elementy potřebují pro svůj popis 9 souřadnic, skalární veličina má pak v položce seznam hodnot tři hodnoty skalárů, zatímco vektorová veličina má v této položce devět hodnot.

6. První testovací úloha

V prvním testu je provedeno porovnání přístupů k modelování na jednoduché puklinové síti o velikosti 4x10 metru se dvěma vodorovnými puklinami a dvěma svislými puklinami, které se kříží s vodorovnými viz obrázek použité sítě Obr. 6-1.

Metodika:

1. Vytvoření sítě pro jednotlivé typy přístupů pomocí programu Gmsh.
2. Vytvoření souboru potřebných pro výpočet ryze puklinového přístupu.
3. Výpočet toku přes síť, rozložení tlaků v síti, proudového pole v síti a transportu, v programu flow123d.
4. Vizualizace výsledku pro ryze puklinový přístup a vynesení grafů nárůstu koncentrace pro vybrané elementy.
5. Vytvoření souborů pro výpočet náhradou porézním médiem. Materiálové konstanty nastavit na hodnoty, aby přetok přes celou oblast byl shodný, jako u ryze puklinového přístupu.
6. Výpočte puklinového modelu a vizualizace výsledných dat. Vynesení grafů.
7. Vytvoření souborů pro výpočet kombinovaného modelu. Materiálové konstanty nastavit na hodnoty, aby přetok přes celou oblast byl shodný, jako u ryze puklinového přístupu.
8. Výpočte puklinového modelu a vizualizace výsledných dat. Vynesení grafů.
9. Zhodnocení získaných výsledků.

Zadaná úlohy:

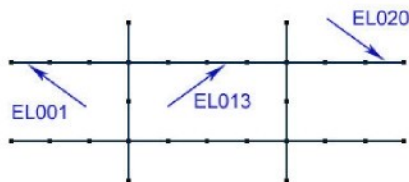
Na ryze puklinovém modelu vypočítat přetok přes oblast, zjistí rozložení tlaků v síti, proudové pole a transport látek. Materiálová konstanta pro ryze puklinový přístup je stanovena $K = 50$ [m/den]. Dále pak na modelech pro kombinovaný a pro porézní síť nastavit materiálové konstanty tak, aby výsledný přetok přes oblast stejný jako v případě ryze puklinového model. U kombinovaného modelu se materiálové konstanty definují v poměru:

$$K_{POREZ} = 0,1 \cdot K_{PUKLIN}.$$

Pro všechny tři části je v souboru *.ini nastavena shodná koncová hodnota času výpočtu transportu (Stop_time = 10).

6.1. Ryze puklinový přístup

Sít obsahuje čtyři pukliny. Dvě vodorovně orientované. Další dvě, které se křížují se svislou orientací, sít se skládá z 28 elementů. Sít je zobrazena na Obr. 6-1.



Obr. 6-1 Ukázka sítě ryze puklinového modelu.

Nastavení propustnosti:

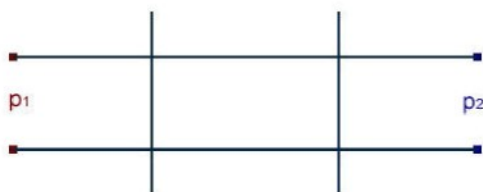
Jak už bylo zmíněno materiálová konstanta je daná a je rovna $K = 50$ [m/den]. Materiál je definovaný pro celou sít. S definovaným typem materiálu 11, podle tabulky (viz Tab 5-1)..

Nastavení okrajových podmínek toku.

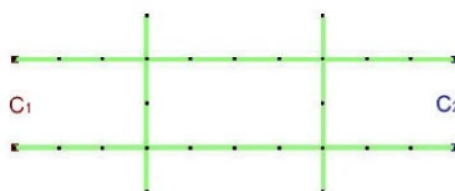
V úloze byla zvolena Dirichletova okrajová podmínka. Konkrétně: $p_1 = 5$ a $p_2 = 1$. Umístění jednotlivých okrajových podmínek je zobrazeno na Obr. 6-2.

Nastavení okrajové podmínky transportu a počáteční koncentrace:

Umístění okrajových podmínek transportu je stejné jako u okrajových podmínek viz Obr. 6-3. U podmínky p_1 je nastavena hodnota koncentrace $c_1 = 10$ [kg/m³], u podmínky p_2 je nastavena hodnota koncentrace $c_2 = 0$ [kg/m³]. Počáteční koncentrace v celé síti je rovna $c = 0$ [kg/m³].



Obr. 6-2 Ukázka umístění okrajových podmínek



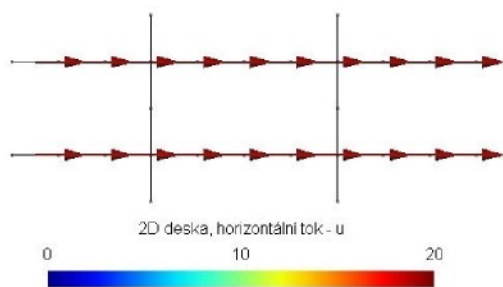
Obr. 6-3 Ukázka umístění podmínek pro transport a počáteční koncentrace

Výsledky proudění:

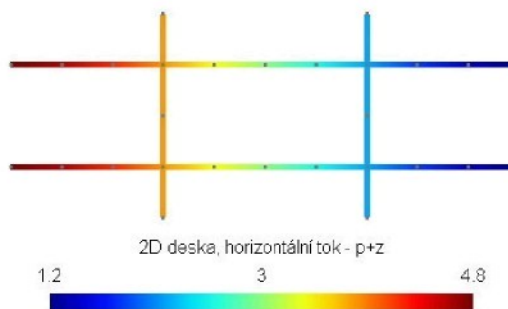
Výsledný tok puklinovou sítí při nastavené materiálové konstantě $K = 50$ [m/den] je roven:

$$40,00 \text{ [m}^3\text{/den]}.$$

Výsledný diagram proudové pole je zobrazen na Obr. 6-4. A diagram rozložení tlaku v síti je zobrazen na Obr. 6-5.

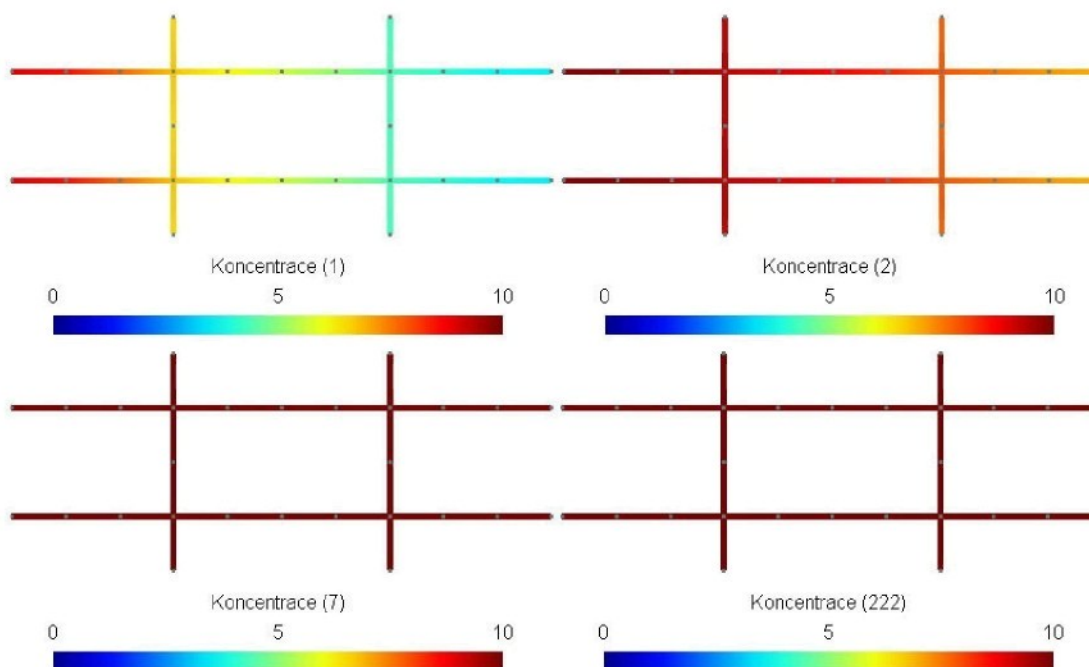


Obr. 6-4 Diagram proudového pole



Obr. 6-5 Diagram rozložení tlaku v síti

Výsledky výpočtu transportu:

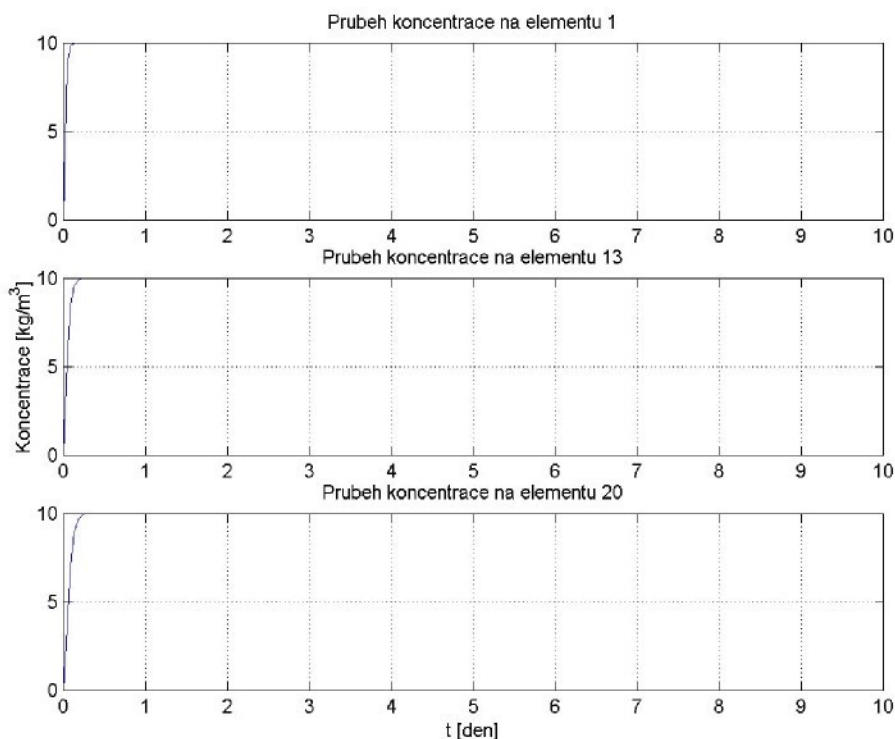


Obr. 6-6 Ukázkové snímky transportu látky, ryze puklinového přístupu

Zobrazením výpočtu transportu dostaneme animaci průběhu koncentrace v síti ryze puklinového přístupu. Z tohoto důvodu jsou zde uvedeny jen čtyři snímky z celkového počtu

222 snímků. Zobrazenými snímky jsou: 1. ($v t = 0,045$ dnů), 2. ($v t = 0,09$ dnů), 7. ($v t = 0,35$ dnů), 222. ($v t = 20$ dnů). Vybrané snímky jsou zobrazeny v Obr. 6-6.

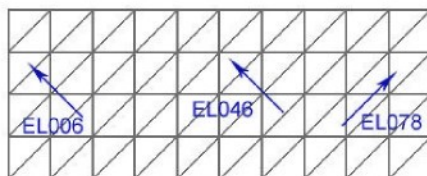
Pro elementy 1, 7, a 20 zobrazen průběh koncentrace, grafy jsou zobrazeny v Obr. 6-7.



Obr. 6-7. Grafy průběhů koncentrace na elementech 1, 7, a 20.

6.2. Náhrada porézním médiem

Druhá část úlohy je zaměřena na ryze puklinový přístup. Pukliny jsou nahrazeny 2D strukturovanou sítí o velikosti 4×10 metrů s 80 elementy, která reprezentuje porézní materiál. Sít' je zobrazena na Obr. 6-8.



Obr. 6-8 Sít' náhrady porézním materiálem

Nastavení propustnosti:

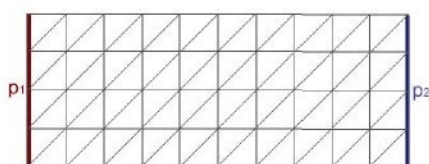
Materiálová konstanta je nastavena tak, aby byl identický přetok sít' jako u ryze puklinového přístupu. Velikost materiálové konstanty je $K = 25$ [m/den] s definovaným typem konstanty 21. Materiálová konstanta typu 21 (viz Tab 5-1).

Nastavení okrajových podmínek toku:

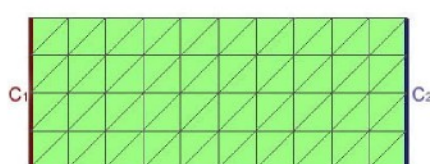
Jako v první části úlohy jsou zvoleny Dirichletovy okrajové podmínky a to $p_1 = 5$ a $p_2 = 1$. Umístění okrajových podmínek je zobrazeno na Obr. 6-9.

Nastavení okrajové podmínky transportu a počáteční koncentrace:

Umístění podmínek transportu je stejně jako u podmínek toku viz Obr. 6-10. U podmínky p_1 je nastavena hodnota koncentrace $c_1 = 10$ [kg/m³], u podmínky p_2 je nastavena hodnota koncentrace $c_2 = 0$ [kg/m³] stejně jako v první části. Počáteční koncentrace v celé síti je rovna $c = 0$ [kg/m³].



Obr. 6-9 Umístění okrajových podmínek



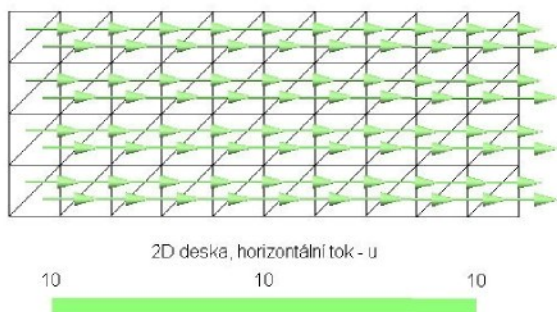
Obr. 6-10 Umístění podmínek transportu a počáteční koncentrace

Výsledky proudění:

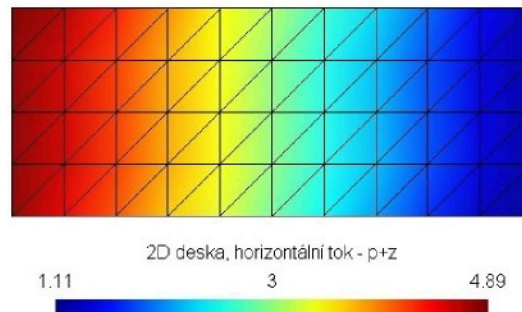
Výsledný přetok v porézním modelu při nastavené materiálové konstantě $K = 25,0$ [m/den] je roven:

$$40,00 \text{ [m}^3\text{/den]}.$$

Diagram proudového pole u náhrady porézním materiálem je zobrazen na Obr. 6-11. A diagram rozložení tlaku s sítí je zobrazen na Obr. 6-12.



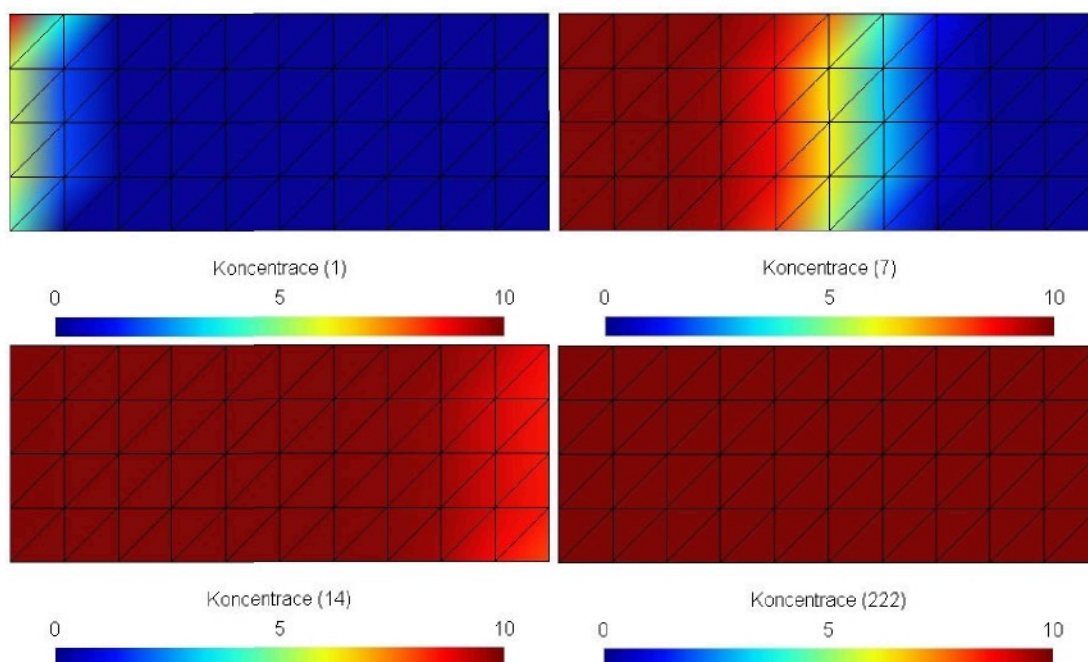
Obr. 6-11 Diagram proudového pole



Obr. 6-12 Diagram rozložení tlaku v síti

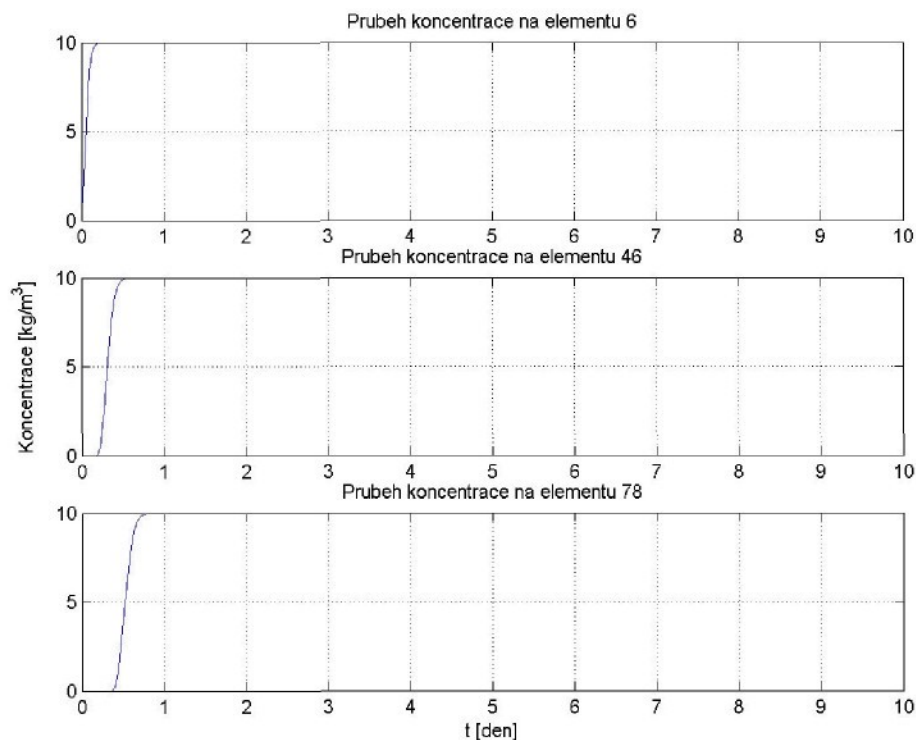
Výsledky výpočtu transportu:

Z celkového počtu 222 snímků jsou zobrazeny čtyři ukázkové snímky. Zobrazenými snímky jsou: 1. (v $t = 0,045$ dnů), 2. (v $t = 0,09$ dnů), 7. (v $t = 0,35$ dnů), 222. (v $t = 20$ dnů). Vybrané snímky jsou zobrazeny v Obr. 6-13.



Obr. 6-13 Ukázkové snímky transportu látky, porézního přístupu.

V grafech zobrazených na Obr. 6-14, je zobrazený průběh koncentrace pro dva vybrané elementy sítě 22 a 62. Umístění těchto elementů je vyznačeno na Obr. 6-8.



Obr. 6-14 Grafy průběhu nárůstu koncentrací na elementech 6, 46 a 78

6.3. Kombinovaný přístup

Třetí část, první testovací úlohy, je zaměřena na kombinovaný přístup. Sít pro tento model je kombinací 1D puklin z první části a 2D sítě porézního materiálu. Sít je zobrazena na Obr. 6-15. Její velikost také 4x10 metrů a počet elementů v síti je roven 108.



Obr. 6-15 Sít pro kombinovaný přístup

Nastavení propustnosti:

Materiálové konstanty jsou nastaveny tak, aby byl identický celkový přetok. Puklinová a porézní část má jiný definovaný materiál. A jak již bylo zmíněno v zadání, poměr materiálových konstant je:

$$K_{\text{POREZ}} = 0,1 \cdot K_{\text{PUKLIN}}$$

Hodnoty konstant definovaných na síť jsou:

$K_{\text{PUKLIN}} = K_2 = 45,626 \text{ [m/den]}$, s definovaným materiálovým typem 11.

$K_{\text{POREZ}} = K_1 = 4,5626 \text{ [m/den]}$, s definovaným materiálovým typem 21.

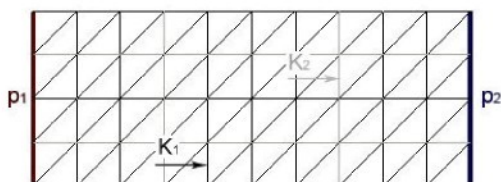
Umístění jednotlivých materiálů je zobrazeno na Obr 16.

Nastavení okrajových podmínek toku:

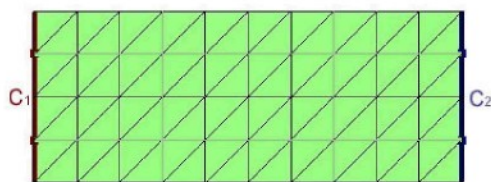
Také zde jsou zvoleny Dirichletovy okrajové podmínky, $p_1 = 5$ a $p_2 = 1$. Umístění je zobrazeno na Obr. 6-16.

Nastavení okrajové podmínky transportu a počáteční koncentrace:

Umístění okrajových podmínek transportu je shodné jako u podmínek toku viz Obr. 6-17. Jako v předchozích dvou částí $c_1 = 10 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ a $c_2 = 0 \text{ [kg/m}^3\text{]}$. A počáteční koncentrace v cele síti je rovna $c = 0 \text{ [kg/m}^3\text{]}$.



Obr. 6-16 Zobrazení okrajových podmínek



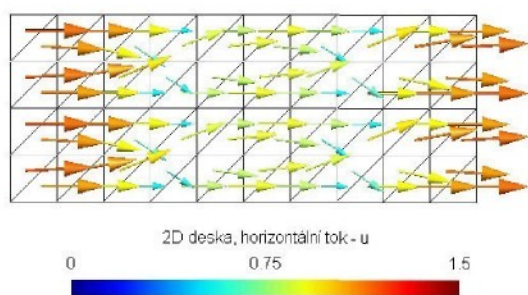
Obr. 6-17 Zobrazení podmínek transportu a počáteční koncentrace

Výsledky toku:

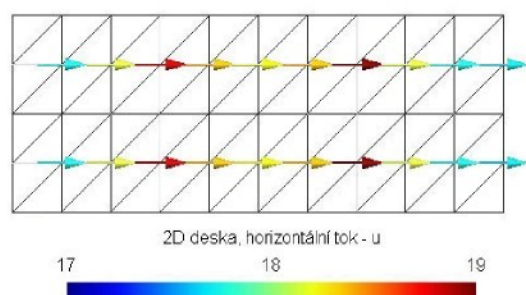
Výsledný tok kombinovaným modelem při nastavených konstantách materiálů $K_2 = K_{\text{PUKLIN}} = 45,626 \text{ [m/den]}$ a $K_1 = K_{\text{POREZ}} = 4,5626 \text{ [m/den]}$ je roven:

$$40,00 \text{ [m}^3\text{/den]}.$$

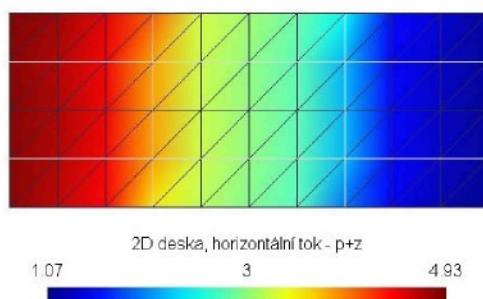
Diagramy proudové pole a diagram rozložení tlaku v síti, jsou zobrazeny na Obr. 6-18-1, 6-18-2 a Obr. 6-19. Diagram proudového pole bylo zapotřebí rozdělit na dvě části, aby byly vidět jednotlivé proudy v digramu. Na Obr. 6-18-1. je diagram zobrazen pro hodnoty 0 až 1,5 a digram pro hodnoty 17 až 19 je zobrazen na Obr. 6-18-2. Z důvodu velkému rozdílu mezi proudy v puklinách a v porézní části. Diagram pro hodnoty 1,5 až 17 není potřeba zobrazovat, v těchto mezích se nevyskytují žádné vypočtené hodnoty.



Obr. 6-18-1 Diagram proudového pole pro hodnoty 0 až 1,5



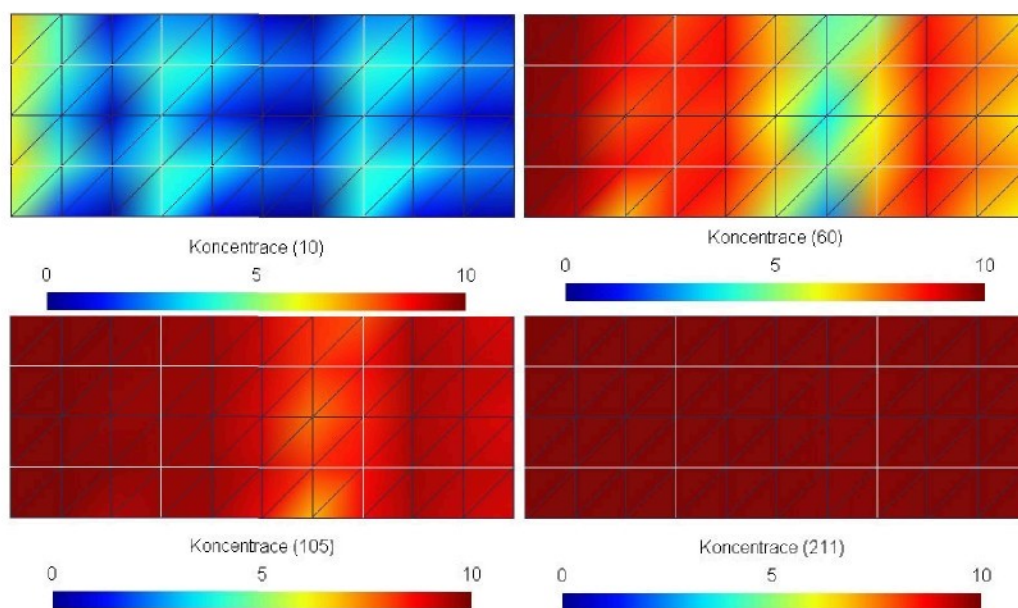
Obr. 6-18-2 Diagram proudového pole pro hodnoty 17 až 19



Obr. 6-19 Diagram rozložení tlaku v síti

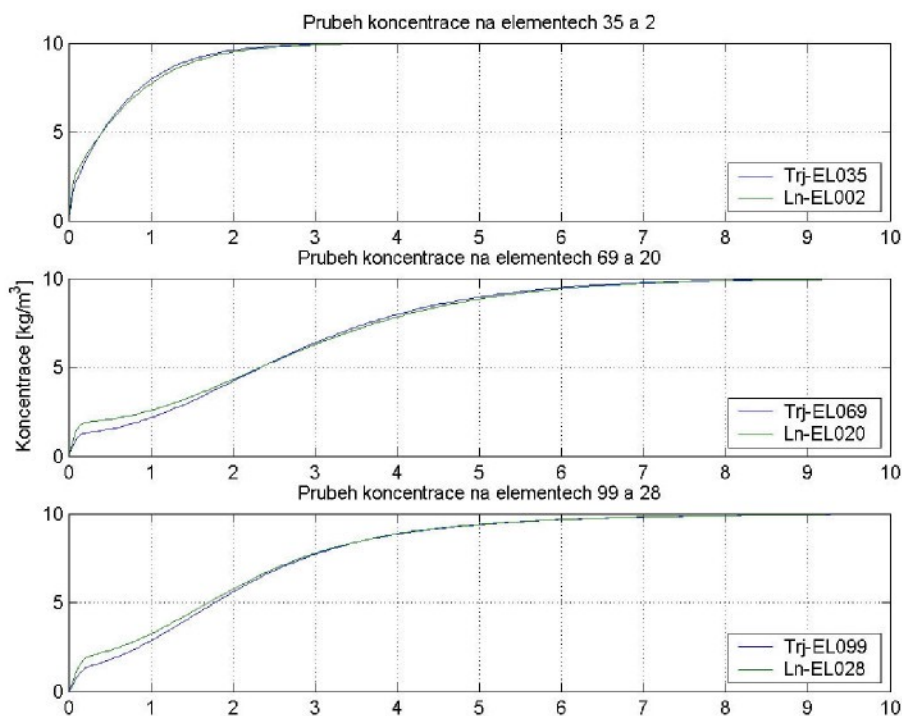
Výsledky výpočtu transportu:

Z výsledné animace transportu látky, v kombinovaném modelu jsou také zobrazeny jen čtyři ukázkové snímky 10 (v $t = 0,47$ dnů), 60 (v $t = 2,84$ dnů), 105 (v $t = 4,98$ dnů), 211 (v $t = 10$ dnů), viz Obr. 6-20. Celá animace má 211 snímků.



Obr. 6-20 Ukázkové snímky diagramu transportu látky v kombinovaném modelu

Dále je zobrazen průběh transportu v kombinovaném modelu na třech liniových elementech (2, 7, 28) a na třech přilehlých trojúhelníkových elementech (35, 69, 99). Umístění jednotlivých elementů je zobrazeno na Obr. 6-18. Výsledný graf je na Obr. 6-21. Průběhy koncentrace na liniových elementech jsou v grafu vyneseny zelenou čarou a průběhy na trojúhelníkových elementech jsou v grafu vyneseny modrou čarou.



Obr. 6-21 Grafy průběhů koncentrací u vybraných elementů

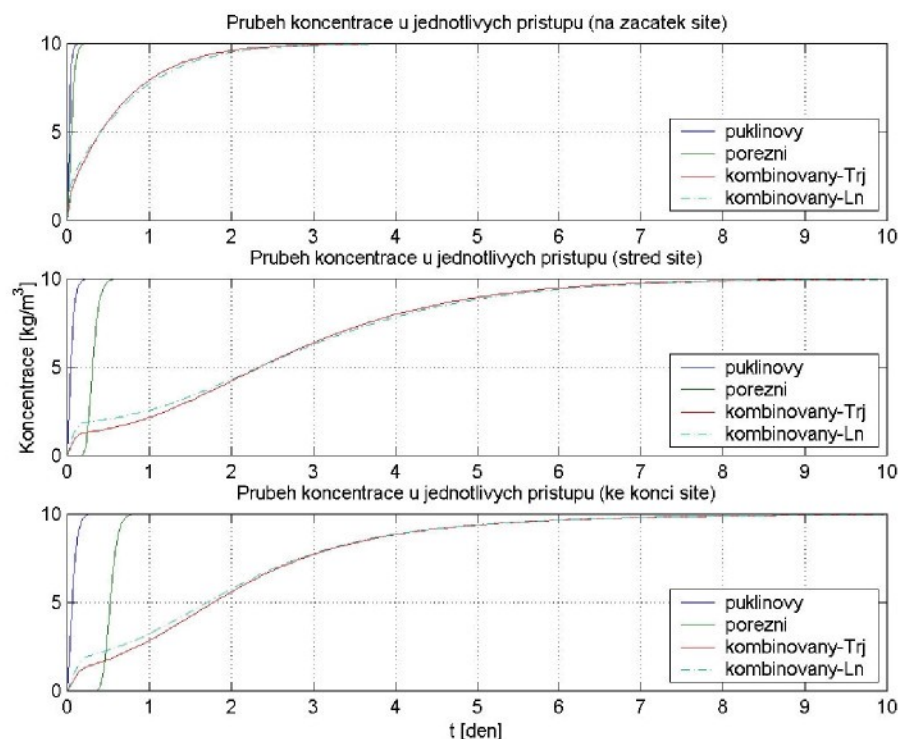
6.4. Vyhodnocení výsledků prvního testu:

Výsledný tok přes oblast je ve všech třech přístupech shodný $40 \text{ [m}^3\text{/den]}$ při nastavených materiálových konstantách:

- ryze puklinový přístup: $K_{\text{PUKLIN}} = 50 \text{ [m/den]}$,
- náhrada porézním médiem: $K_{\text{POREZ}} = 25 \text{ [m/den]}$,
- kombinovaný přístup: $K_{\text{PUKLIN}} = 45,626 \text{ [m/den]}$, $K_{\text{POREZ}} = 4,5626 \text{ [m/den]}$.

U ryze puklinového přístupu (Obr. 6-4), který je tvořen dvěma pulinami horizontálně orientovanými a dvěma puklinami vertikálními. Celý tok přes tuto síť je veden jen horizontálními puklinami. Ve vertikálně orientovaných puklinách nedochází k žádnému toku. U náhrady porézním médiem (Obr. 6-11) je proudové pole homogenní v celé síti. Za to u kombinovaného přístupu je rozložení proudového pole pestřejší. Hlavní tok u kombinovaného

modelu (Obr. 6-18-2), je veden dvěma horizontálními puklinami. V porézní části modelu je rozložení hodnot v mezích 0 až 1,5 [m³/den]. Z diagramu (Obr. 6-18-1) je patrné, že obě dvě vertikální pukliny se v síti chovají jako hráz a z tohoto důvodu je nejmenší rychlost toku v porézním médiu je ve střední části a za vertikálními puklinami. Rozložení tlaků v síti je stejné u všech tří přístupů. Od okrajové podmínky p1 se hodnota snižuje k hodnotě p2.



Obr. 6-22 Grafy porovnání průběhů koncentrací jednotlivých přístupů

Výsledky transportu z velké části kopírují výsledky proudového pole, ale zde se ukazuje, že se nemusí transportní látka šířit jen ve směru toku. To je možné vidět u ryze puklinového přístupu, kde podle proudového pole je tok jen v horizontálních puklinách, ale transportovaná látka se šíří i do vertikálních puklin. Přestože podle diagramu proudového pole v nich žádný tok není. Šíření je v nich zapříčiněno vzlínáním a jinými molekulárními jevy, to je patrné ze snímků průběhu koncentrace Obr. 6-6. U náhrady porézním médiem je šíření látky v celé šířce sítě shodné a rovnoměrně se šíří v kladném směru osy x. U kombinovaného přístupu je nárůst koncentrace v síti rozdílný. Puklinami dojde k rychlému transportu přes síť a dále pak pomalejšímu šíření porézním médiem. Nejpomalejší nárůst koncentrace v síti je možné sledovat ve střední části sítě mezi dvěma vertikálními puklinami. Vertikální pukliny se zde chovají jako zdroje, z níž se do porézních částí začne šířit transportovaná látka. Jednotlivé nárůsty koncentrace v sítích je možné vidět ve vynesných grafech pro vybrané elementy.

Pro lepší porovnání průběhu koncentrace u jednotlivých přístupů, jsou hodnoty vyneseny do jednoho grafu Obr. 6-22. Vybrané elementy, pro které jsou vyneseny hodnoty, jsou vyznačeny na Obr. 6-1, 6-8 a 6-15. Z něho je vidět, že nejrychlejšímu šíření dochází u ryze puklinového přístupu, kde k dosažení maximální koncentrace $10 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ dojde v řádech hodin. Nejpomalejší šíření je vidět u kombinovaného přístupu, kde k dosažení koncentrace $10 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ trvá 8 dní. U kombinovaného modelu, je pomalejší nárůst dán šířením látky z puklin do porézního okolí.

7. Druhá testovací úloha

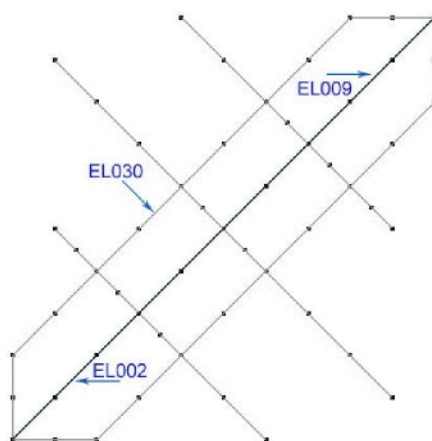
Úkolem druhého testu je porovnat přístupy k modelování na jednoduché puklinové síti čtvercového tvaru o velikosti 10x10 metru s jednou hlavní diagonální puklinou a s několika vedlejšími puklinami.

Zadaná úlohy:

Na ryze puklinovém modelu vypočítat přetok přes oblasti, zjistit tok hlavní puklinou i vedlejšími puklinami a transport látek. Propustnost hlavní puklinou je $K = 100$ [m/den] a vedlejší $K = 10$ [m/den]. Dále pak na přístupech pro kombinovanou a porézní síť nastavit materiálové konstanty tak, aby byl výsledný přetok přes oblast stejný jako v případě ryze puklinového modelu. A zároveň tok hlavní a vedlejšími puklinami byl identický jako u ryze puklinového přístupu. Pro všechna tři části je v souboru *.ini nastavena shodná koncová hodnota času výpočtu transportu (Stop_time = 20).

7.1. Ryze puklinový přístup

Síťový model obsahuje jednu hlavní puklinu, dvě vedlejší pukliny rovnoběžné s hlavní puklinou a tři paralelní pukliny Obr. 7-1.



Obr. 7-1 Ukázka sítě ryze puklinového modelu.

Nastavení propustnosti:

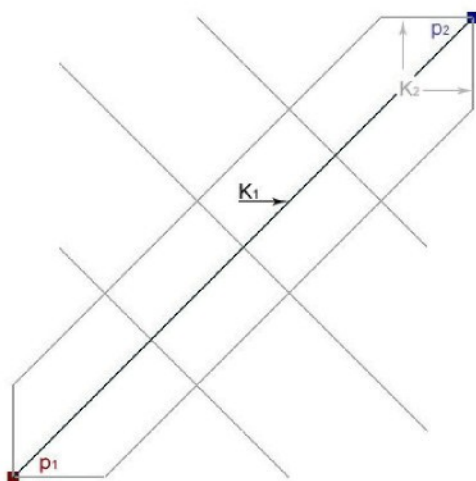
Hlavní puklině byla nastavena materiálová konstanta $K_1 = 100$ [m/den]. Ostatním puklinám byla přiřazena materiálová konstanta $K_2 = 10$ [m/den]. Na Obr. 7-2 je vyznačeno umístění propustností. Obě definované konstanty jsou typu 11 (viz Tab 5-1).

Nastavení okrajových podmínek toku.

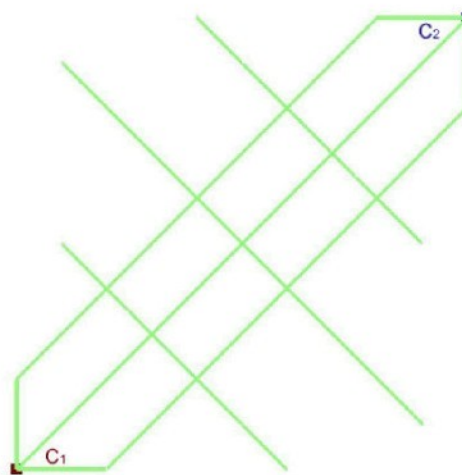
Pro tuto úlohu byly zvoleny Dirichletovy okrajové podmínky a to $p_1 = 5$ a $p_2 = 1$. Umístění jednotlivých podmínek je vyznačeno na Obr. 7-2.

Nastavení okrajové podmínky transportu a počáteční koncentrace:

Umístění okrajových podmínek transportu jsou shodné stejně jako u podmínek toku viz Obr. 7-3. U podmínky p_1 je nastavena hodnota koncentrace $c_1 = 10$ [kg/m³], u podmínky p_2 je nastavena hodnota koncentrace $c_2 = 0$ [kg/m³]. V celé síti je nastavena nulová počáteční koncentrace.



Obr. 7-2 Ukázka umístění okrajových podmínek a definovaných materiálů



Obr. 7-3 Ukázka umístění podmínek transportu a počáteční koncentrace v síti

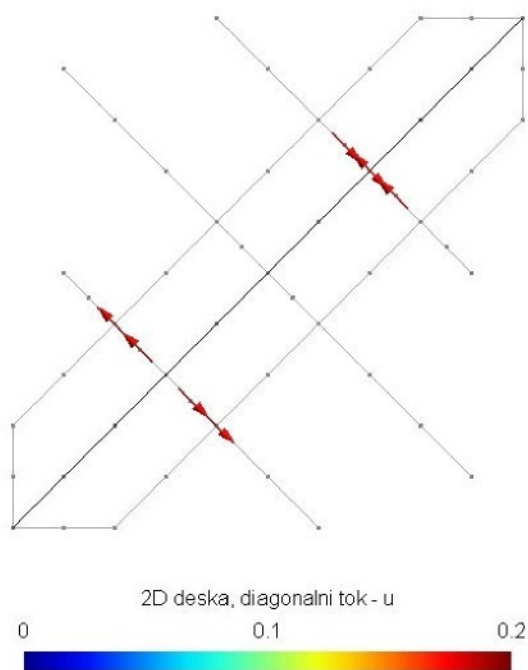
Výsledky proudění:

Výsledný tok puklinovou sítí při nastavených materiálových konstantách $K_1 = 100$ [m/den] a $K_2 = 10$ [m/den] je roven:

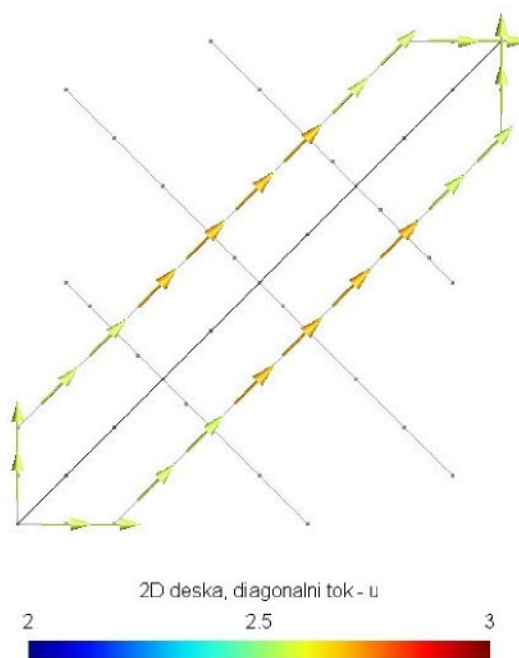
$$33,52 \text{ [m}^3\text{/den]}.$$

Diagram proudového pole je rozdělen do tří samostatných diagramů. Důvodem tohoto způsobu zobrazení dat je velký rozsah výsledných hodnot. Kdyby byly hodnoty zobrazeny v jednom diagramu, který by zobrazoval rozsah 0 až 28,5, nebyly by patrné proudy o nízkých hodnotách. Diagram jsem rozdělil do mezí 0 až 0,2, 2 až 3 a 27,5 až 28,5. Rozmezí hodnot, které nejsou zobrazeny, nebylo zapotřebí zobrazit, jelikož se zde nevyskytovaly žádná data. A také, aby bylo zobrazení proudového pole co nejvýraznější a byly dobře patrné rozdíly.

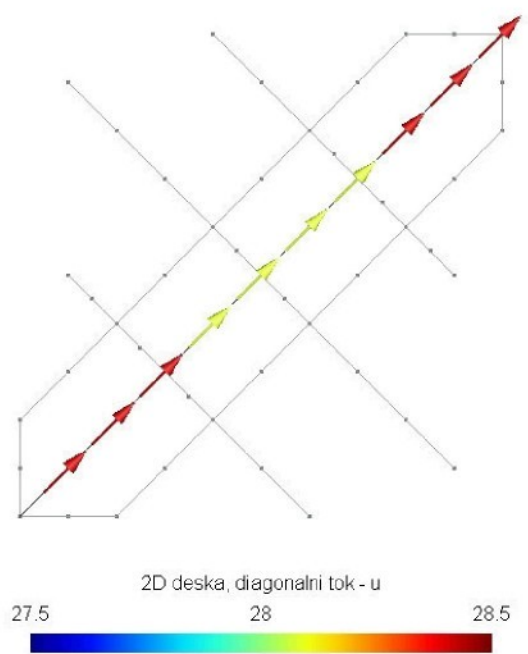
Diagramy proudového pole jsou zobrazeny na obrázcích 7-4-1, 7-4-2 a 7-4-3. Diagram rozložení tlaků v síti je zobrazen na Obr. 7-5.



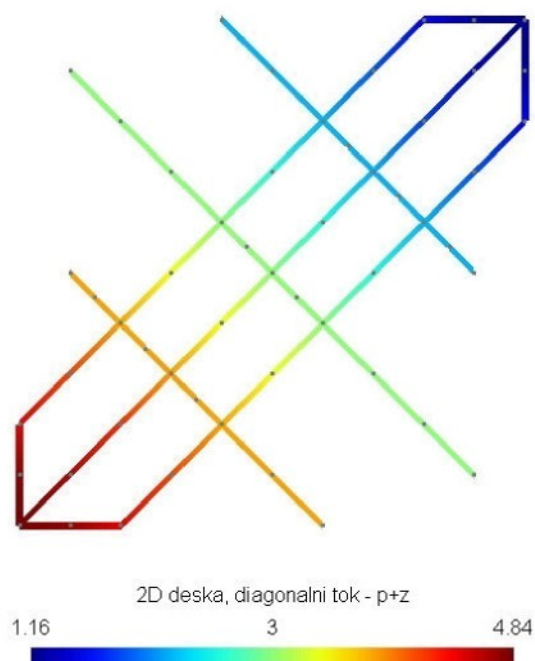
Obr. 7-4-1 Diagram proudového pole
(hodnoty: 0 až 0,2)



Obr. 7-4-2 Diagram proudového pole
(hodnoty: 2 až 3)



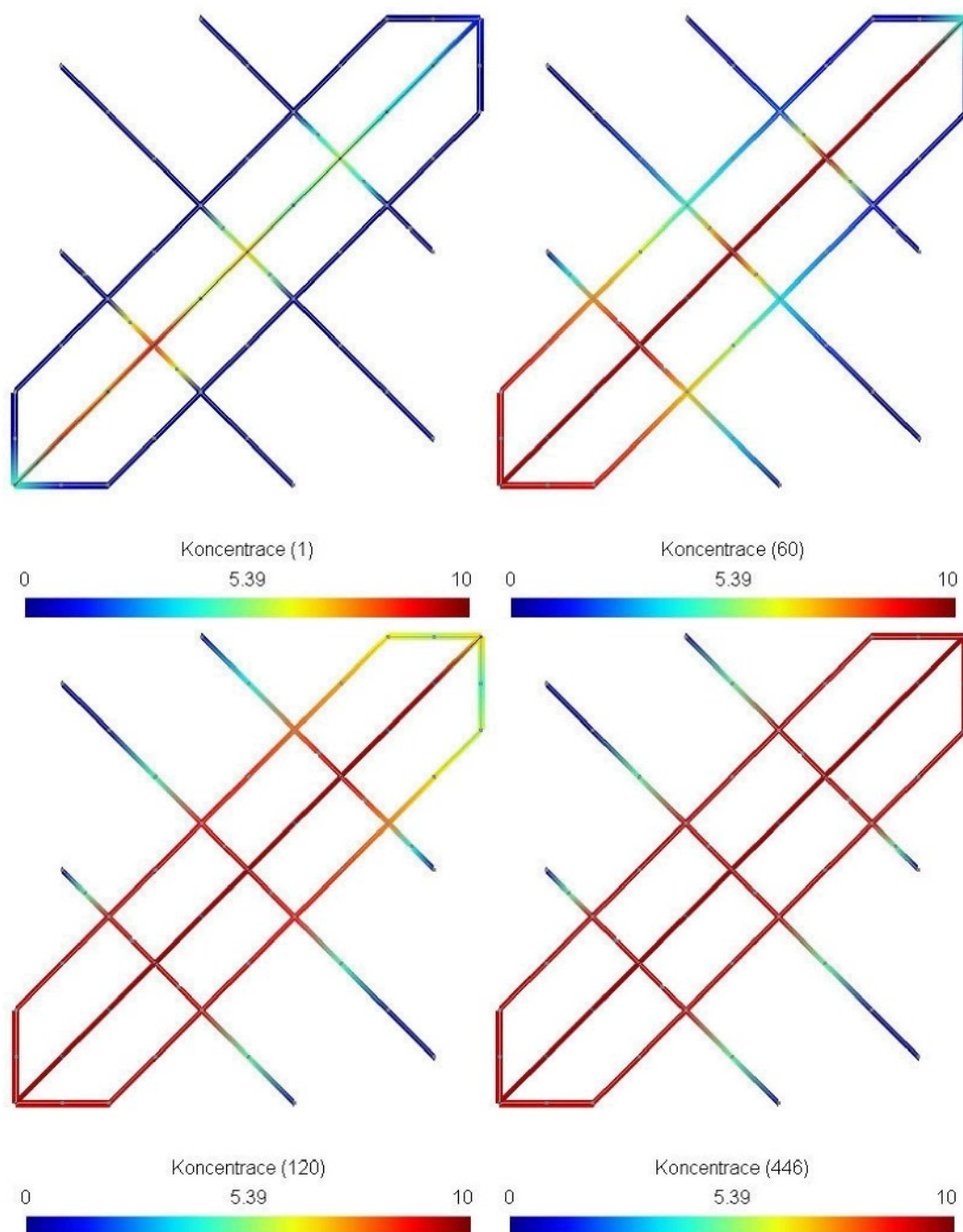
Obr. 7-4-3 Diagram proudového pole
(hodnoty: 27,5 až 28,5)



Obr. 7-5 Diagram rozložení tlaku v síti

Výsledky transportu látek:

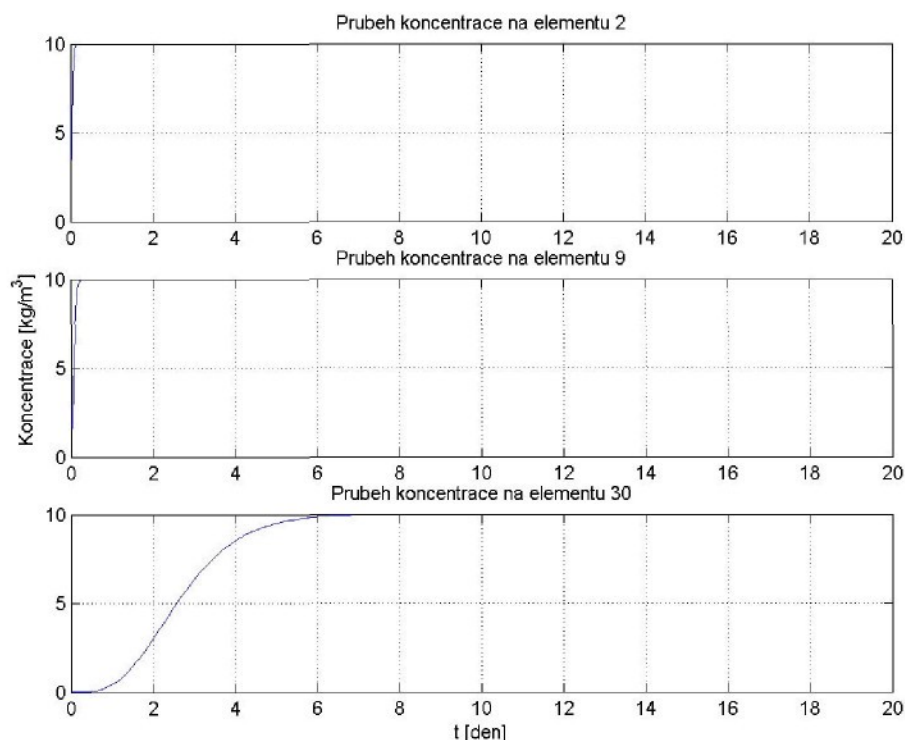
Zobrazením výpočtu transportu dostaneme animaci průběhu koncentrace v síti ryze puklinového přístupu. Z tohoto důvodu jsou zde uvedeny čtyři ukázkové snímky z celkového počtu 446 snímků. Vybrané ukázkové snímky jsou 1. ($v t = 0,05$ dnů), 60. ($v t = 2,68$ dnů), 120. ($v t = 5,37$ dnů), 446. ($v t = 20$ dnů). Ukázkové snímky jsou zobrazeny v Obr. 7-6.



Obr. 7-6 Ukázkové snímky transportu látky pro ryze puklinový model

Dále je pro tři elementy sítě vynesena graf průběhu koncentrace v čase. Vybrány jsou dva elementy 2, 9 ležící na začátku a konci hlavní pukliny a jeden element 30 ležící na

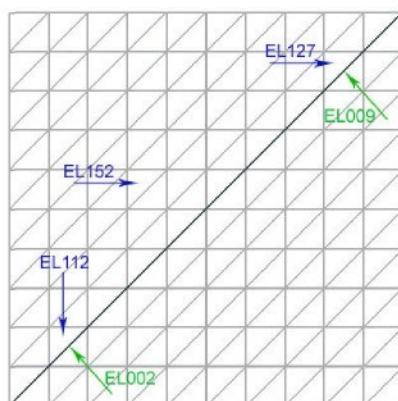
vedlejší puklině. Umístění vybraných elementů je vyznačeno na Obr. 7-1 a graf je zobrazen na Obr. 7-7.



Obr. 7-7 Grafy průběhů koncentrací v elementech 2, 9 a 30.

7.2. Kombinovaný přístup

Druhá část úlohy kombinovaný přístup k modelu proudění puklinou zachovává hlavní puklinu a vedlejší pukliny jsou nahrazeny porézním médiem. Model má stejnou velikost jako ryze puklinový 10x10 metru. Sít' je zobrazena na **Obr. 7-8**.



Obr. 7-8 Sít' kombinovaného přístupu

Nastavení propustnosti:

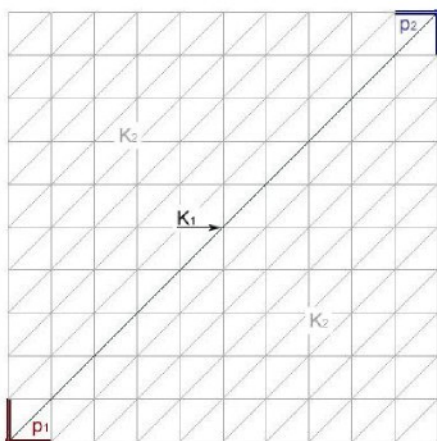
Materiálové konstanty jsou nastaveny tak, aby byl identický celkový přetok a tok hlavní puklinou i vedlejšími porézní částí byl stejný jako u ryze puklinového přístupu. Pro liniové elementy je nastavena hodnota $K_1 = 97,0$ [m/den] a s definovaným typem konstanty 11. Pro oblast nahrazenou porézním materiálem je nastaveno $K_2 = 5,02$ [m/den] typu 21 (Tab. 5-1). Umístění jednotlivých materiálových konstant je možné vidět na Obr. 7-9.

Nastavení okrajových podmínek toku:

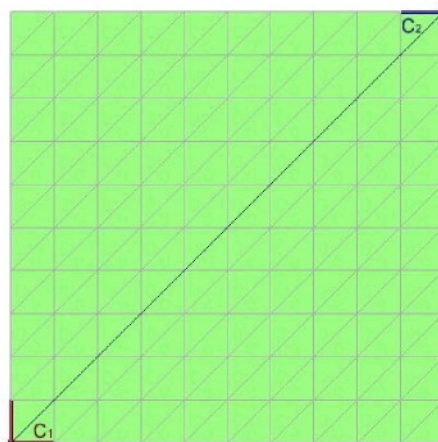
Jako v první části úlohy jsou zvoleny Dirichletovy okrajové podmínky, konkrétně: $p_1 = 5$ a $p_2 = 1$. Umístění je vidět na Obr. 7-9.

Nastavení okrajové podmínky transportu a počáteční koncentrace:

Umístění podmínek transportu je stejné jako u okrajových podmínek toku viz Obr. 7-10. U podmínky p_1 je nastavena hodnota koncentrace $c_1 = 10$ [kg/m³], u podmínky p_2 je nastavena hodnota koncentrace $c_2 = 0$ [kg/m³] stejně jako v první části. Počáteční koncentrace v celé síti je rovna $c = 0$ [kg/m³].



Obr. 7-9 Umístění okrajových podmínek a definovaných materiálů



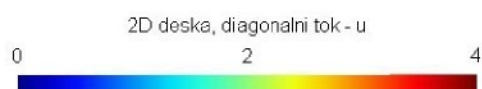
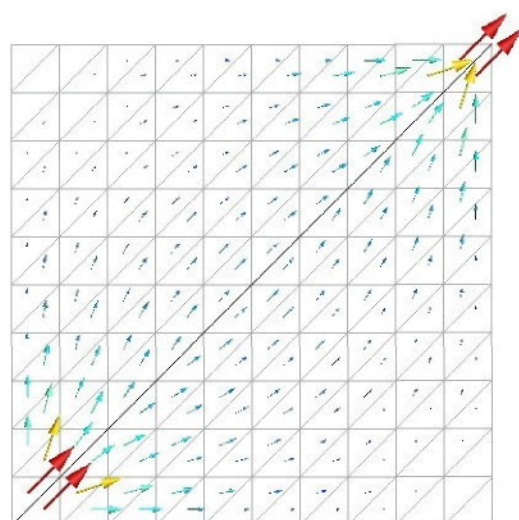
Obr. 7-10 Umístění podmínek pro transport a počáteční koncentrace

Výsledky proudění:

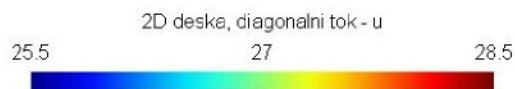
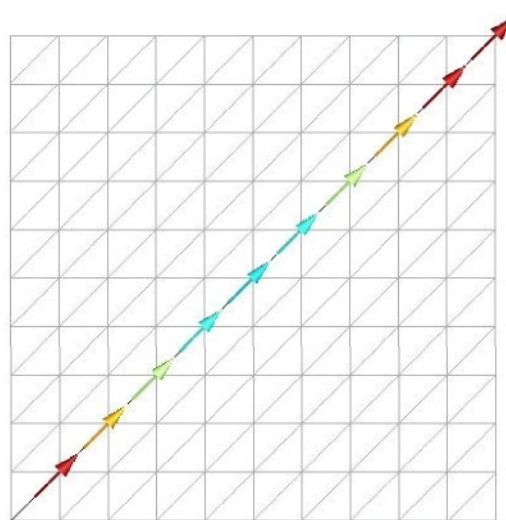
Výsledný tok kombinovaný modelem při nastavených materiálových konstantách $K_1 = 97,0$ [m/den] a $K_2 = 5,02$ [m/den] je roven:

$$33,52 \text{ [m}^3\text{/den]}.$$

Výsledný diagram proudové pole a diagram tlak v síti je zobrazeny na Obr 7-11-1, 7-11-2 a Obr. 7-12.

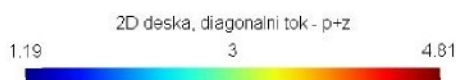
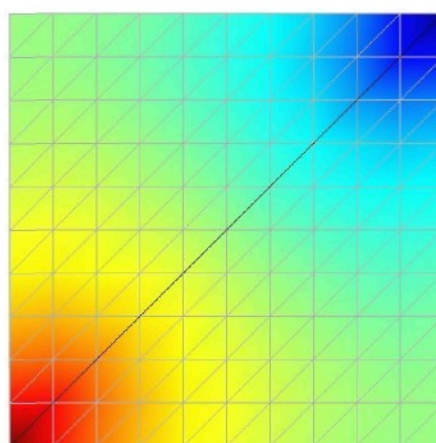


Obr. 7-11-1 Diagram proudového pole pro hodnoty 0 až 4



Obr. 7-11-2 Diagram proudového pole pro hodnoty 25,5 až 28,5

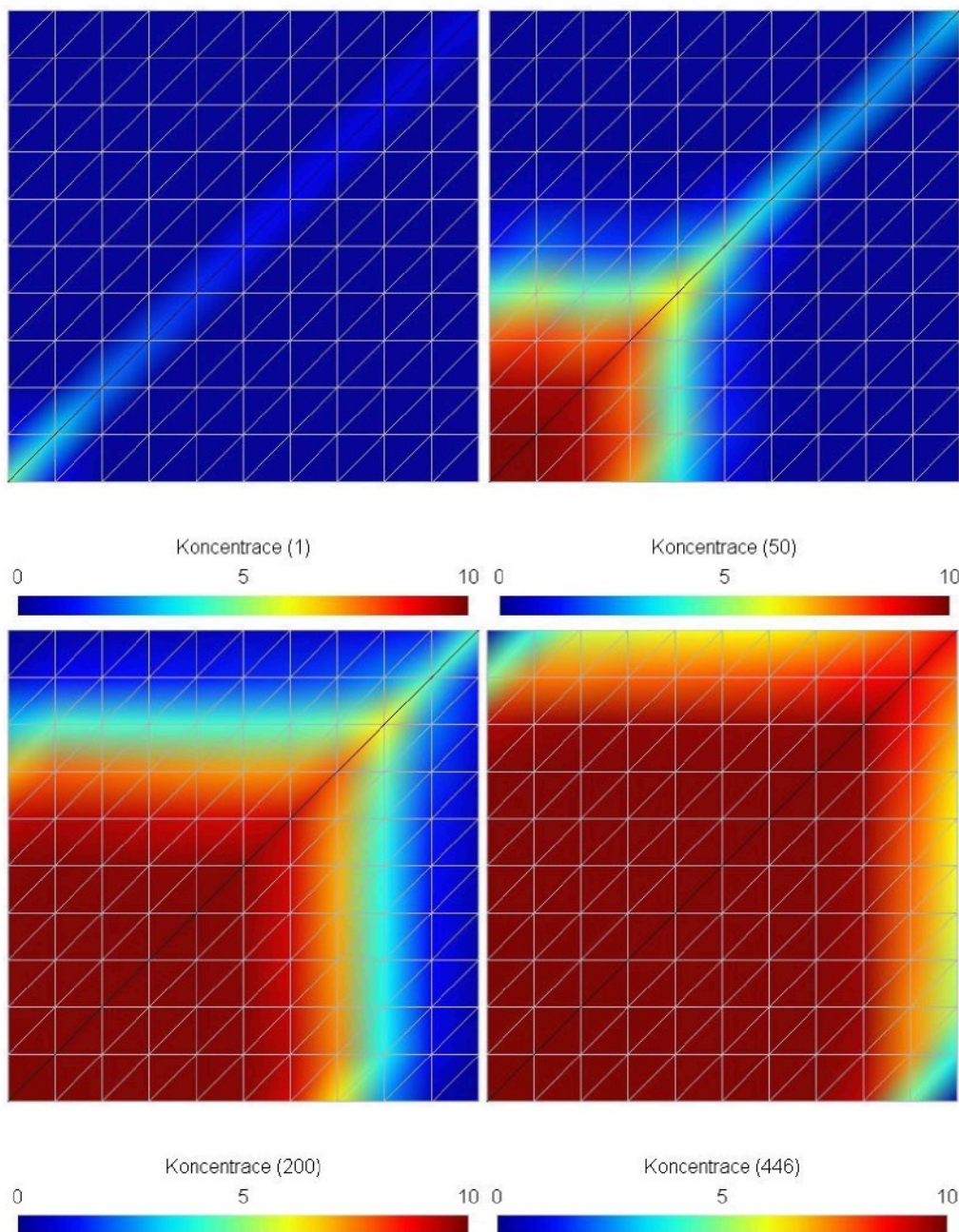
Jako u ryze puklinového modelu je výsledný diagram proudového pole zobrazeno v několika samostatných diagramech. Aby byl výsledný průběh proudového pole dobře patrný jsou zvoleny příslušné meze. V mezích 4 až 25,5 nejsou žádná data pro zobrazení.



Obr. 7-12 Diagram rozložení tlaku v síti

Výsledky výpočtu transportu látek:

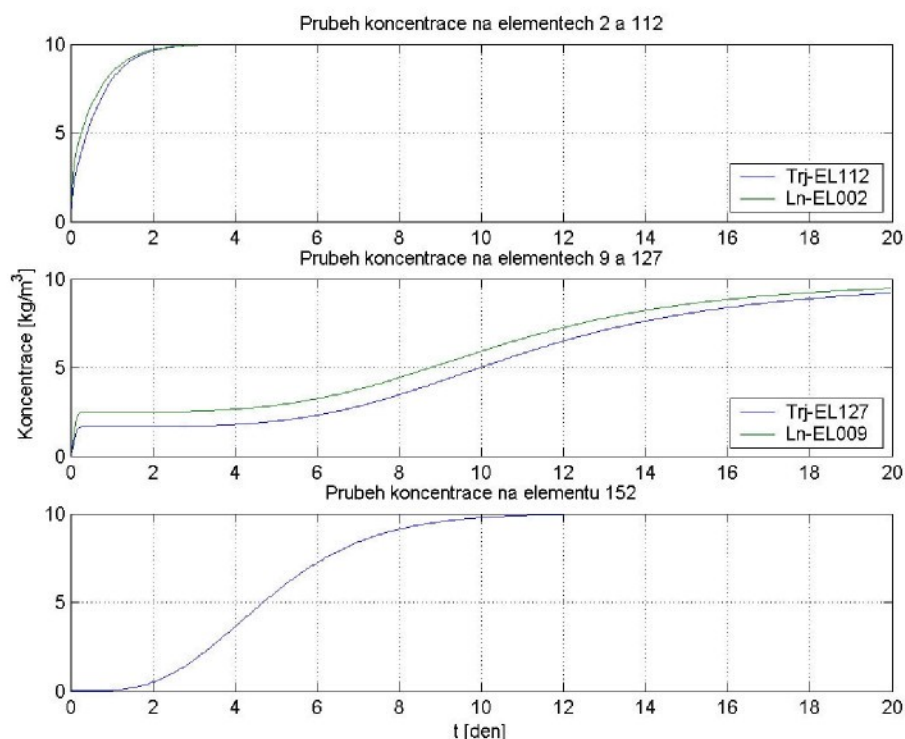
U výsledku výpočtu transportu sítí je výstup animace. Z toho důvodu jsou zde uvedeny čtyři snímky z celé animace, která má celkem 446 snímků. Vybrané snímky jsou 1. ($v t = 0,04$ dnů), 50. ($v t = 2,24$ dnů), 200. ($v t = 8,97$ dnů), 446. ($v t = 20$ dnů). Snímky jsou umístěny v Obr. 7-12.



Obr. 7-12 Ukázkové snímky transportu látky pro kombinovaný model.

Pro názornější ukázkou nárůstu koncentrace v síti je vybráno několik elementů, pro které se výsledné hodnoty vynesou do grafů. Vybrané elementy sítě jsou: trojúhelníkový 112 a

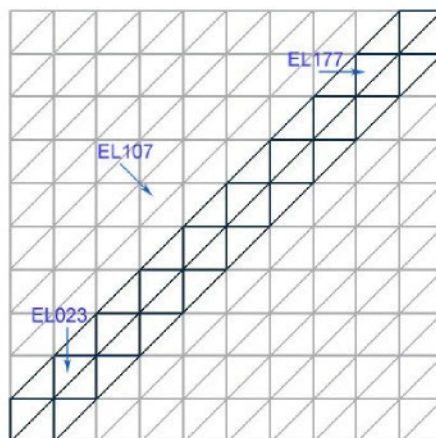
sním sousední liniový 2, dále pak vzdálenější trojúhelníkový 127 a sním sousední 2 a nakonec jeden element trojúhelníkový umístěný dále od hlavní pukliny a to elementy 152. Průběh na liniových prvcích je v grafech vykreslen zelenou čarou a trojúhelníkových elementech modrou čarou. Umístění jednotlivých elementů je patrné z Obr. 7-8. Graf s vynesnými hodnotami je zobrazen na Obr. 7-13.



Obr. 7-13 Grafy průběhu nárůstu koncentrací v kombinovaném modelu

7.3. Náhrada porézním médiem

Třetí část úlohy je provedena náhradou celé puklinové sítě porézním médiem o stejné propustnosti. Hlavní a vedlejší pukliny mají různou propustnost. Sít modelů náhrady porézním médiem má také rozměry 10x10 metrů jako v předchozích částech testu



Obr. 7-14 Sít' pro model náhrady porézním médiem

Nastavení propustnosti:

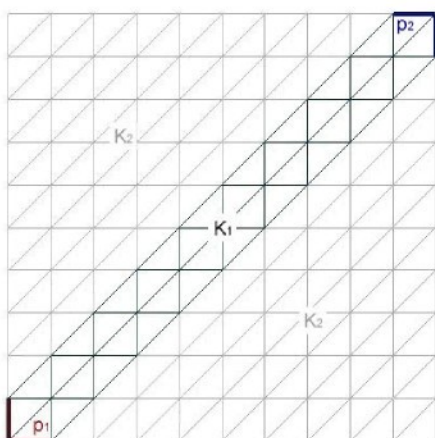
Propustnost je nastavena tak, aby byl identický celkový přetok a tok hlavní puklinou i vedlejšími porézní částí byl stejný. Jako v první a druhé části. Pro elementy hlavní pukliny je nastavena hodnota $K_1 = 68,65$ [m/den]. Pro oblast nahrazující vedlejší pukliny je nastavena hodnoty $K_2 = 4,09$ [m/den]. Obě materiálové konstanty jsou typu 21. Umístění jednotlivých materiálových konstant je vidět na Obr. 7-15.

Nastavení okrajových podmínek toku:

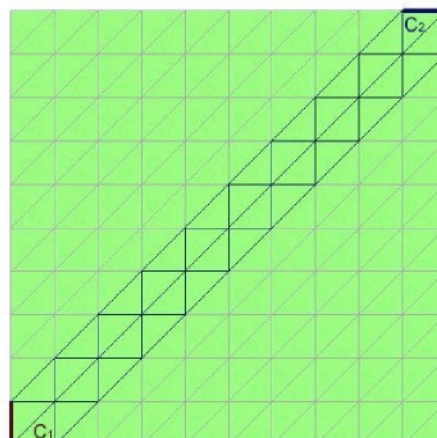
Také zde jsou zvoleny Dirichletovy okrajové podmínky $p_1 = 5$ a $p_2 = 1$. Umístění jednotlivých podmínek je zobrazeno na Obr. 7-15.

Nastavení okrajové podmínky transportu a počáteční koncentrace:

Umístění okrajových podmínek transportu jsou shodné stejně jako u okrajových podmínek viz obr. 16. Jako v předchozích dvou částech $c_1 = 10$ [kg/m³] a $c_2 = 0$ [kg/m³]. Počáteční koncentrace v celé síti je rovna $c = 0$ [kg/m³].



Obr. 7-15 Zobrazení umístění okrajových podmínek a definovaných materiálů



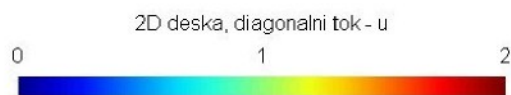
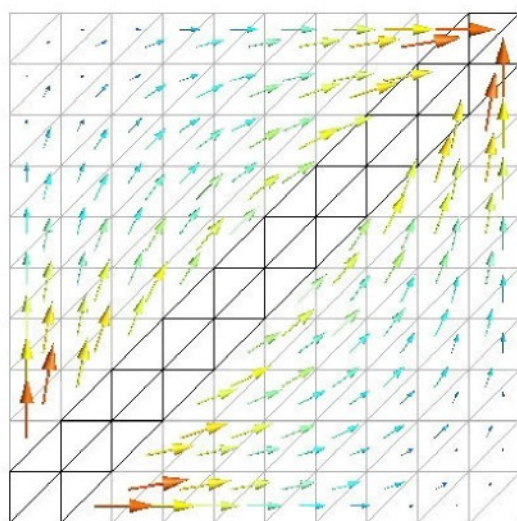
Obr. 7-16 Zobrazení podmínek transportu a počáteční koncentrace

Výsledky proudění:

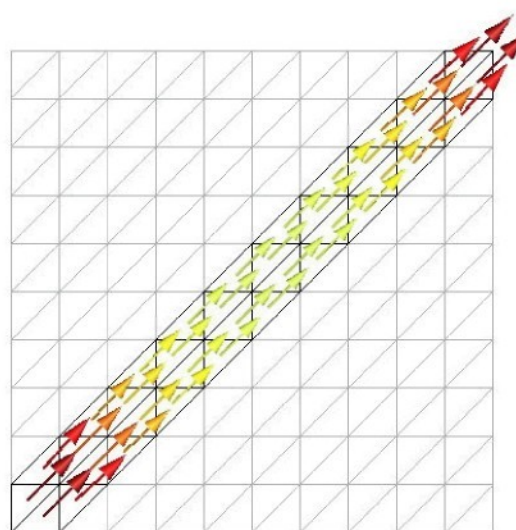
Výsledný tok modelem náhrady porézním médiem při definovaných materiálových konstantách $K_1 = 68,65[\text{m/den}]$ a $K_2 = 4,09[\text{m/den}]$ je roven:

$$33,52 [\text{m}^3/\text{den}].$$

Výsledné diagramy proudové pole a tlaku v síti, jsou zobrazeny na Obr. 7-17-1, 7-17-2. a Obr. 7-18.

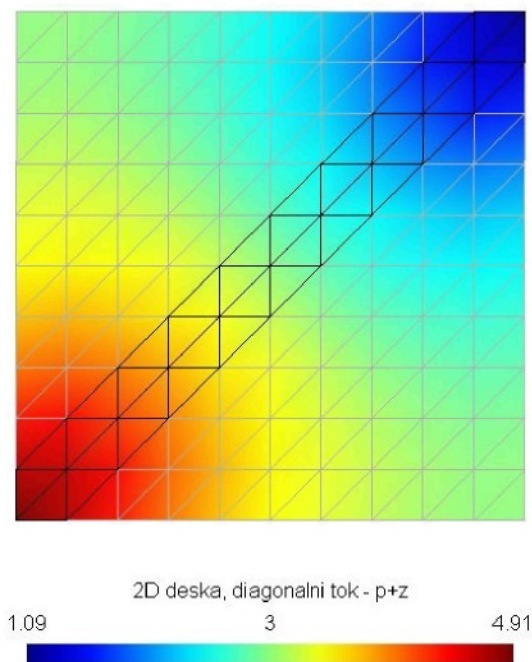


Obr. 7-17-1 Diagram proudového pole pro hodnoty 0 až 2



Obr. 7-17-2 Diagram proudového pole pro hodnoty 12 až 24

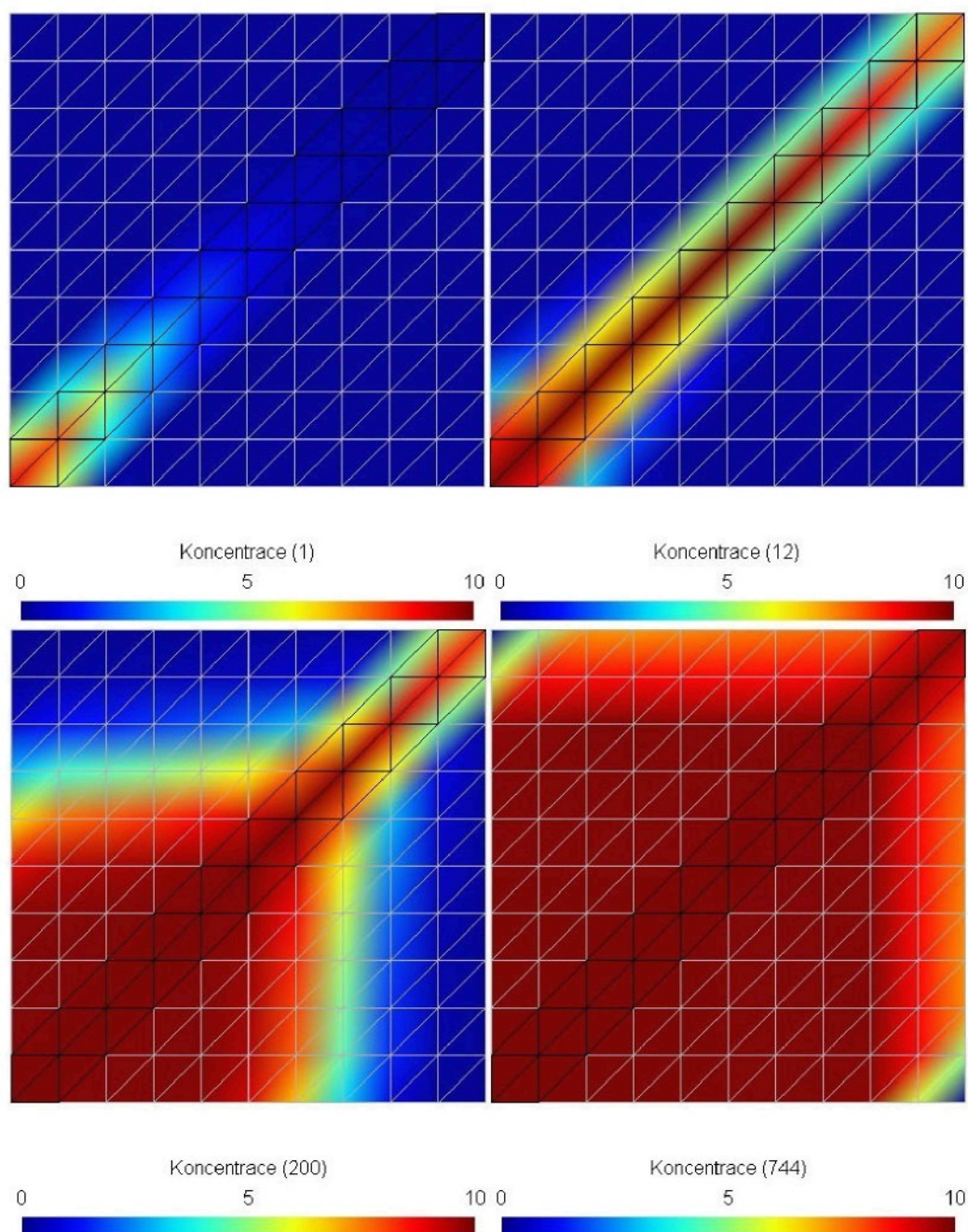
Jako u předchozích dvou případů zde je diagram proudového pole rozdělen do dvou mezí. A to 0 až 2 a 12 až 24, tyto meze obsáhnou veškeré vypočtené hodnoty.



Obr. 7-18 Diagram rozložení tlaku v síti

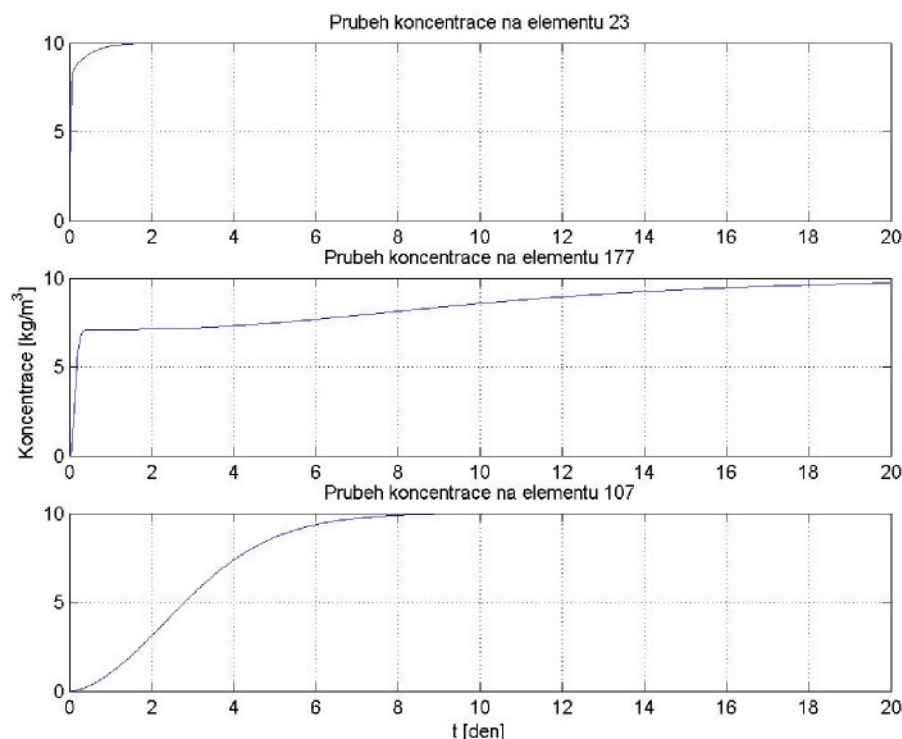
Výsledky transportu látek:

Z výsledné animace průběhu transportu látky, která má 744 snímků, jsou zobrazeny tyto čtyři snímky: 5. (v t = 0,13 dnů), 12. (v t = 0,32 dnů), 200. (v t = 5,38 dnů), 744. (v t = 20 dnů).



Obr. 7-19 Ukázkové snímky diagramu transportu látky pro porézní model

Dále je zobrazen průběh koncentrace ve třech trojúhelníkových elementech. Dvou elementů 23 a 177 ležících na diagonále. A jednoho elementu, který je umístěn dále od diagonály (element 107). Grafy jsou na Obr. 7-20. Umístění elementů v síti modelu, je patrné z Obr. 7-14.



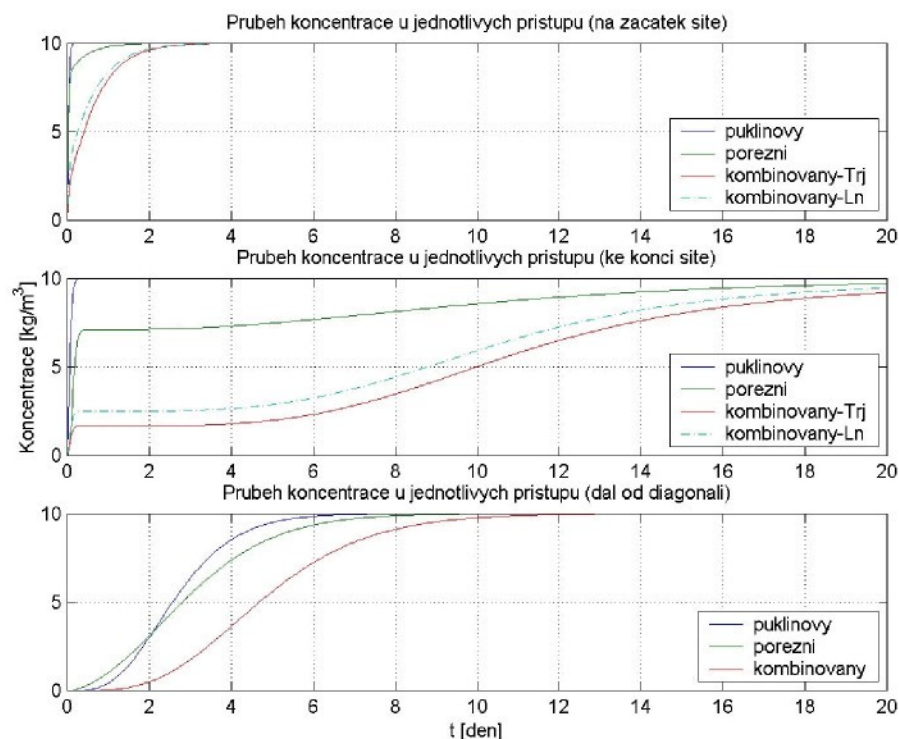
Obr. 7-20 Grafy průběhů koncentrací v elementech 23, 177 a 107.

7.4. Vyhodnocení výsledků druhého testu:

Výsledný tok přes oblast je ve všech třech případech shodný $33,52 \text{ [m}^3/\text{den}]$ při nastavených materiálových konstantách:

- ryze puklinový přístup: $K_1 = 100 \text{ [m/den]}$, $K_2 = 10 \text{ [m/den]}$
- náhrada porézním médiem: $K_1 = 97 \text{ [m/den]}$, $K_2 = 5,02 \text{ [m/den]}$
- kombinovaný přístup: $K_1 = 68,65 \text{ [m/den]}$, $K_2 = 4,09 \text{ [m/den]}$

Z porovnání jednotlivých proudových diagramů je vidět, že ve všech třech případech je hlavní tok na diagonální puklině či její porézní náhradě. U kombinovaného přístupu a náhrady porézního media je rozložení proudového pole přibližně shodné, liší se v maximálních hodnotách proudů. U těchto přístupů dochází k proudění v téměř celé vedlejší oblasti. Oproti tomu u ryze puklinového modelu dochází k proudění jen v některých puklinách. Ve všech třech případech se hodnota tlaku v sítích snižuje od OKP p_1 k p_2 .



Obr. 7-21 Grafy porovnání průběhů koncentrací jednotlivých přístupů

Největší rozdíly jsou patrné u úloh transportu. U ryze puklinového přístupu je vidět velmi rychlý nárůst koncentrace v hlavní puklině a pozvolnější ve vedlejších puklinách. Z ukázkových snímků transportu je patrné, že nedojde k šíření transportované látky do celé sítě, i když v místech s nulovým tokem dojde k částečnému šíření za pomoci vztlínání a jiných molekulárních jevů. Z výsledku kombinovaného přístupu je patrné, že dojde k maximálnímu nárůstu koncentrace v celé síti, až na dva rohové elementy. Pro lepší srovnání nárůstu koncentrace v síti byly hodnoty pro elementy (viz Obr 7-1, 7-8, 7-14) vyneseny do jednoho grafu. Z grafů (na Obr. 7-21) je patrný pozvolný nárůst koncentrace u kombinovaného přístupu. Do hodnoty $2,5 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ je nárůst v hlavní i vedlejší části sítě strmý, ale od hodnoty se růst koncentrace prudce snižuje. U náhrady porézním médiem patrný podobný nárůst koncentrace v síti jako u kombinovaného přístupu, ale zlomovou hodnotou je zde přibližně $c = 8,5 \text{ [kg/m}^3\text{]}$. Od hodnoty $c = 8,5 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ dochází velmi pozvolnému nárůstu koncentrace. Nárůsty koncentrací v vedlejších částí sítě jednotlivých přístupů je o poznání pozvolnější než je tomu v hlavní části. Přibližně do hodnoty $2,5 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ je nárůst koncentrace v porézním médiu rychlejší a od hodnoty $2,5 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ se nárůst v porézním médiu zpomaluje oproti ryze puklinovému modelu. Nejpomalejší nárůst koncentrace je u kombinovaného přístupu.

U ryze puklinové ho přístupu je z grafů patrné, že netrvá ani den, aby se na výstupu ze sítě objevila maximální hodnota koncentrace (v řádu hodin). Druhý nejrychlejší nárůst maximální hodnoty na výstupu je patrný u náhrady porézního média, přibližně je doba trvání 20 dnů. Nejpomalejší nárůst je u kombinovaného přístupu trvající víc než 20 dnů.

8. Třetí testovací úloha

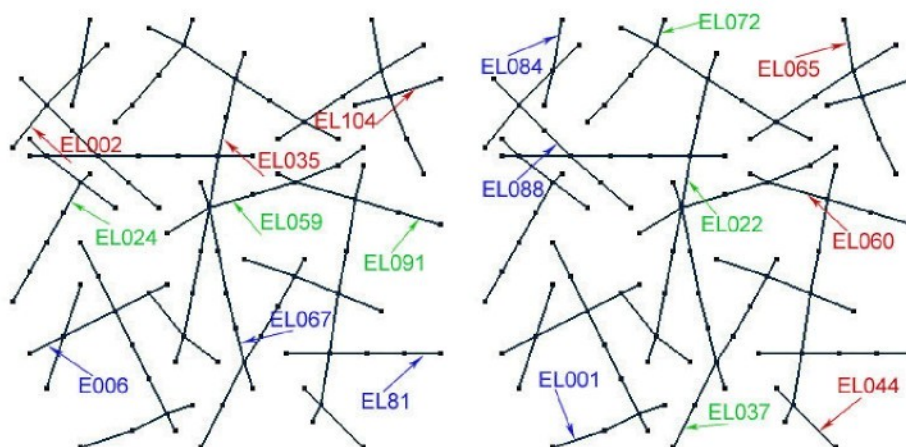
Třetí test je zaměřený na porovnání ryze puklinového přístupu a náhradu porézním materiálem. Test je proveden na čtvercové síti o velikosti 5x5 metrů. Ryze puklinová síť je tvořena puklinami, které jsou náhodně rozloženy. Tato síť se svojí strukturou blíží k reálné situaci. Pro náhradu porézním médiem je vytvořena strukturovaná síť o stejné velikosti s hustotou 15 x 15 elementů. Pro oba přístupy je třeba provést výpočet toku a transportu v horizontálním a vertikálním směru proudění. Pro porézní materiál je dána materiálová konstanta $K_{\text{POREZ}} = 2.5 \text{ [m/den]}$.

Metodika:

1. V program jsou Gmsh vygenerovány sítě jak pro náhradu porézním médiem, tak pro ryze puklinový přístup
2. V druhém kroku je zapotřebí připravit potřebné soubory, ve kterých jsou uloženy data o materiálech, o použitých okrajových podmínkách a podmínkách potřebných pro výpočet transportu. V tomto testu je potřeba připravit dvě sady souborů pro horizontální tok v kladném směru osy x a vertikální tok v kladném směru osy y.
3. Poté jsou provedeny výpočty jak pro horizontální, tak pro vertikální směr pomocí programu flow123d.
4. Podle výsledků pro náhradu porézním médiem, jsou nastaveny materiálové konstanty u ryze puklinového modelu, tak aby byl shodný tok přes oblast
5. Poté jsou provedeny výpočty pro ryze puklinový přístup.
6. V závěrečném kroku je provedena vizualizace výsledků a pro vybrané elementy zobrazený průběh koncentrace a zhodnocení výsledků.

8.1. Ryze puklinový přístup s horizontální a vertikálním směr tokem

Síť pro ryze puklinový model je složená s náhodně rozložených puklin. Síť má také velikost 5x5 metrů. Ukázka sítě je na Obr. 8-1. Síť je pro oba směry toku a transportu shodná. Čas výpočtu doby transportu je nastavena na 10 dnů.

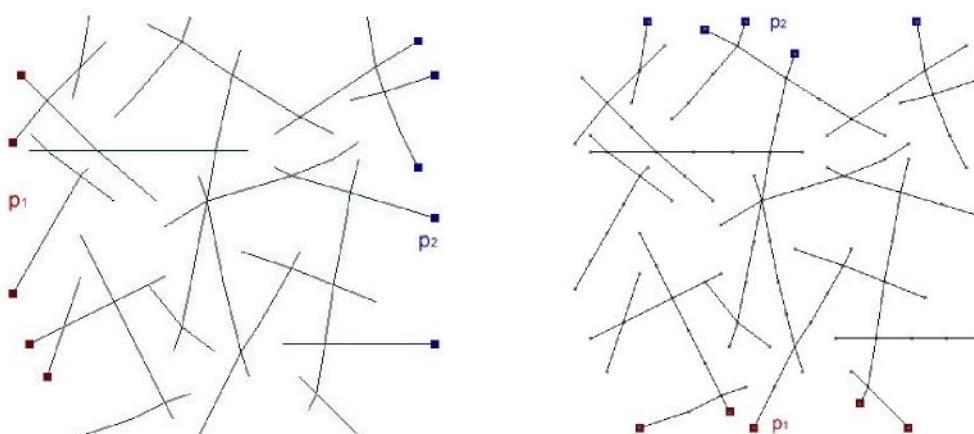


Obr. 8-1 Ukázka sítě pro ryze puklinový přístup a vybraných elementů, pro které jsou vyneseny hodnoty nárůstu koncentrace do grafů. Nalevo je zobrazena síť pro horizontální tok a napravo pro vertikální tok.

Nastavení propustnosti:

Jak už bylo zmíněno materiálová konstanta je daná pro porézní materiál a je rovna $K_{\text{POREZ}} = 2,5$ [m/den]. Z toho plyne, že pro ryze puklinové modely musí být nastaveny takové hodnoty, aby byl tok přes jejich oblasti stejný.

U horizontálního směru a vertikálního směru toku byla nastavena konstanta K na hodnotu: $K_{\text{PUK}_H} = K_{\text{PUK}_V} = 6,5$ [m/den] s typem 11.



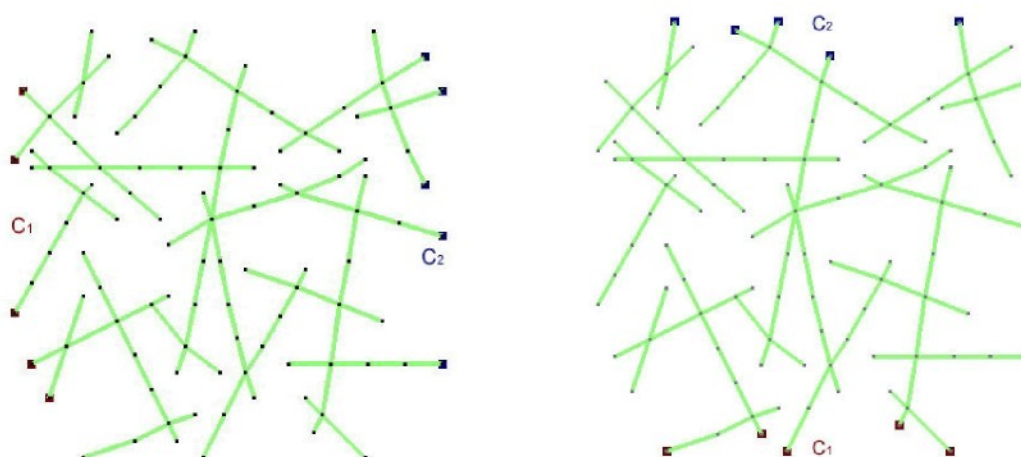
Obr. 8-2 Ukázka umístění okrajových podmínek. Nalevo pro horizontální tok a napravo pro vertikální tok

Nastavení okrajových podmínek toku:

Také zde jsou zvoleny Dirichletovy okrajové podmínky. Pro oba testy mají shodné hodnoty. Podmínky $p_1 = 5$ a podmínka $p_2 = 1$. Umístění podmínek pro oba případy je zobrazeno na Obr. 8-2.

Nastavení krajové podmínky transportu a počáteční koncentrace:

Umístění okrajových podmínek transportu je shodné stejně jako u podmínek toku viz Obr. 8-2. U podmínky p_1 je nastavena hodnota koncentrace $c_1 = 10$ [kg/m³], u podmínky p_2 je nastavena hodnota koncentrace $c_2 = 0$ [kg/m³]. Počáteční koncentrace v celé síti je rovna $c = 0$ [kg/m³].



Obr. 8-3 Ukázka umístění podmínek pro transport a počáteční koncentrace v síti.

Nalevo pro horizontální tok a napravo pro vertikální tok

Zobrazení výsledků proudění:

Výsledný horizontální tok přes oblast puklinové sítě při nastavené materiálové konstantě $K_{\text{PUK_H}} = 6,5$ [m/den] je roven:

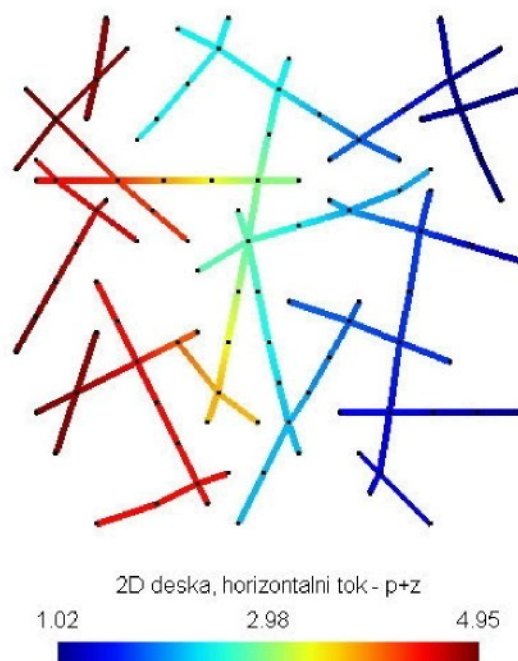
$$10,00 \text{ [m}^3\text{/den]}.$$

Výsledný vertikální tok přes oblast puklinové sítě při nastavené materiálové konstantě $K_{\text{PUK_V}} = 6,5$ [m/den] je roven:

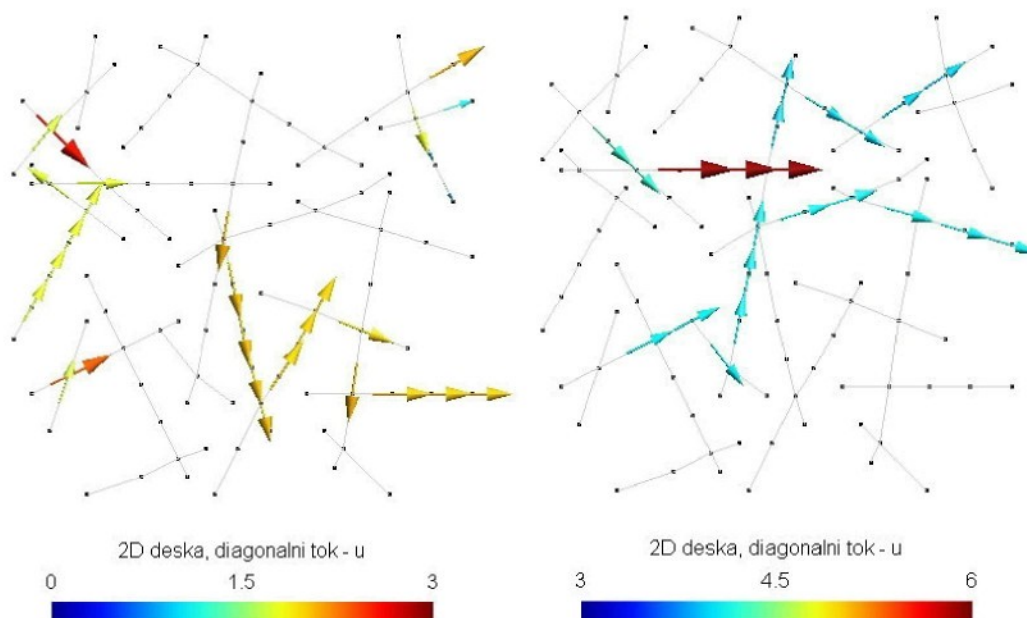
$$10,00 \text{ [m}^3\text{/den]}.$$

Výsledný digram rozložení tlaků v síti v horizontálním směru toku a digram proudového pole je zobrazen na obrázcích Obr. 8-4 a Obr. 8-5. Diagram proudového pole, který je možno spatřit na Obr. 8-5. Pro lepší zobrazení vypočtených hodnot je rozdělen do dvou samostatných diagramů. Nalevo jsou zobrazeny hodnoty v mezích 0 až 3 a v pravém

diagramu jsou zobrazeny hodnoty v mezích 3 až 6, tak aby byly patrné i proudy o menších hodnotách.



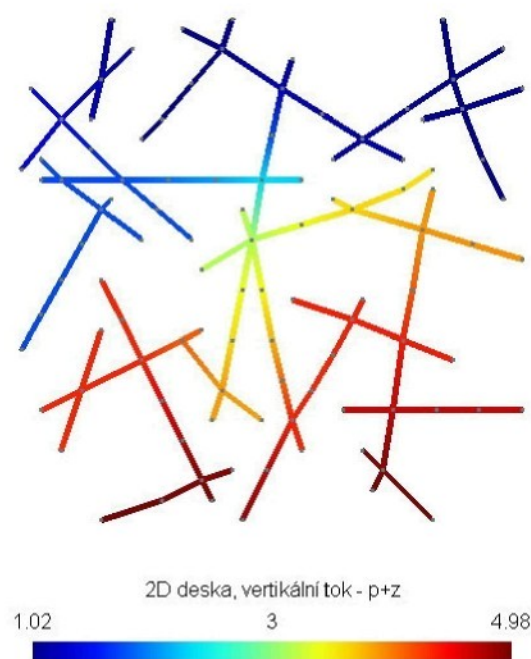
Obr. 8-4 Diagram rozložení tlaků v síti pro horizontální směr toku.



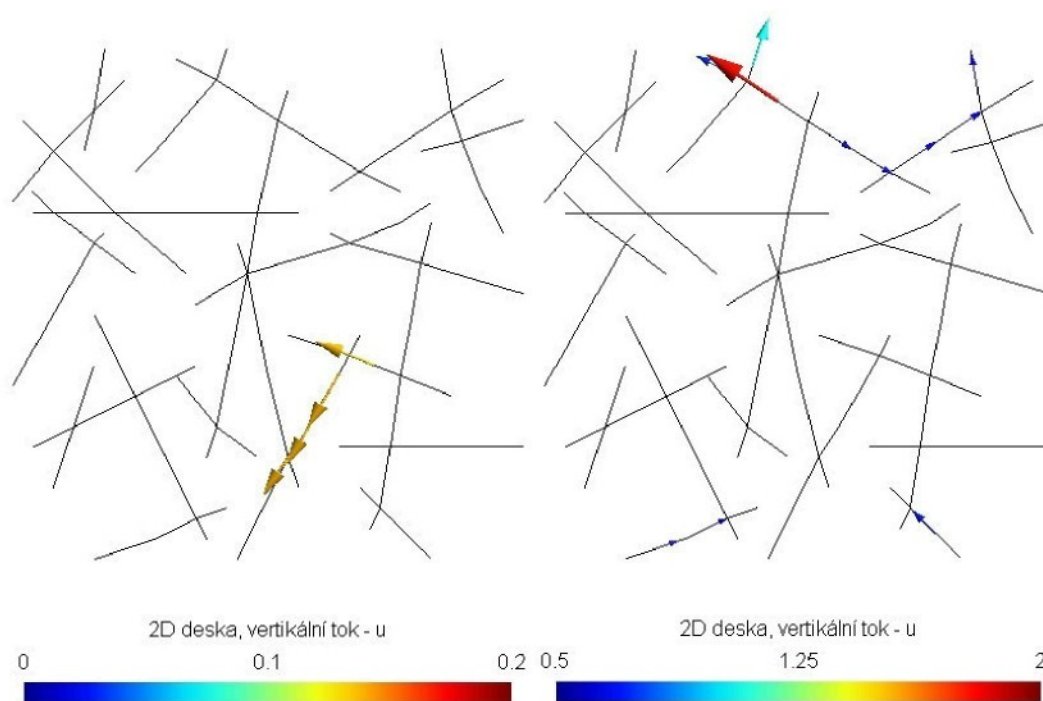
Obr. 8-5 Diagram proudového pole pro horizontální směr toku, pro hodnoty 0-3 (nalevo) a pro hodnoty 3-6 (napravo).

Diagram rozložení tlaku v síti pro vertikální směr toku je zobrazený na Obr. 8-6. Diagram proudového pole je zobrazený na obrázcích 8-7-1 a 8-7-2. Z důvodu velkého rozmezí zobrazovaných hodnot bylo nutné rozdělit diagram do čtyř samostatných diagramů.

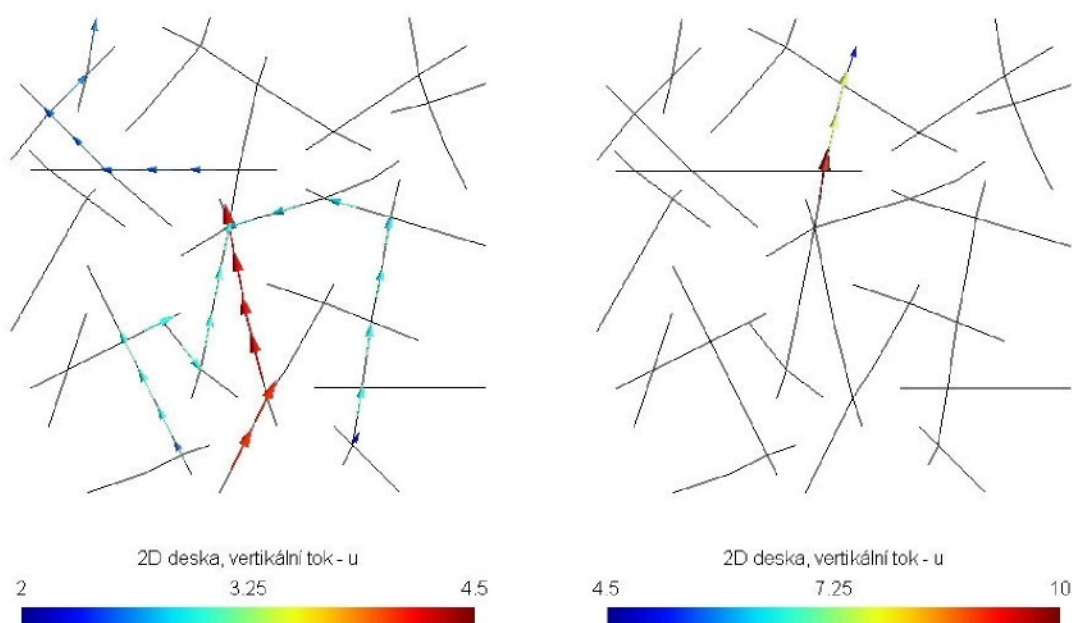
Na diagramy s mezemi 0 – 0,2 a 0,5 – 2 na Obr. 8-7-1. A na diagramy s mezemi 2- 4,5 a 4,5 – 10 na Obr. 8-7-2.



Obr. 8-6 Diagram rozložení tlaků v síti pro vertikální směr toku.



Obr. 8-7-1 Diagramy proudového pole s hodnotami v mezích 0 – 0,2 (nalevo) a 0,5 – 2 (napravo).

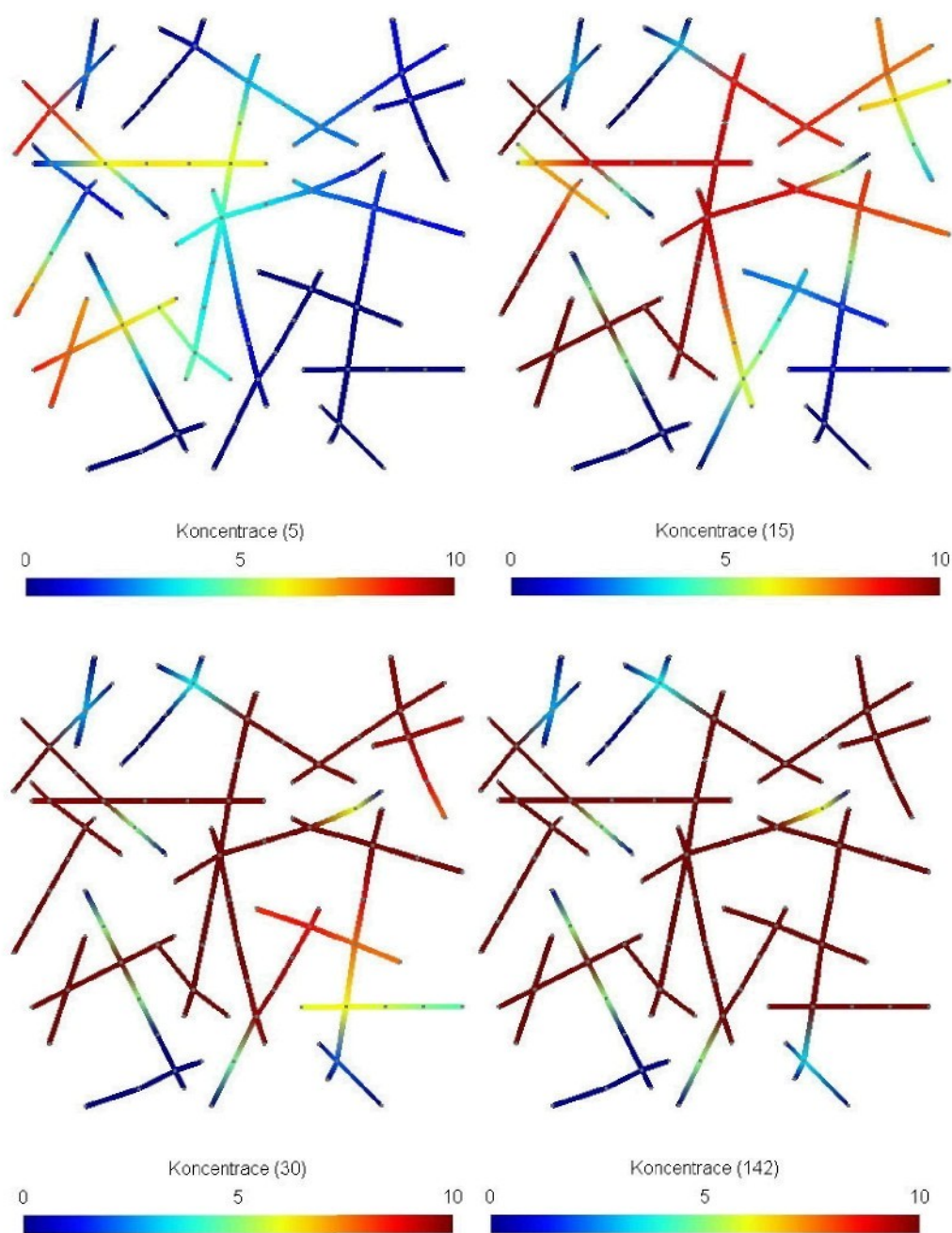


Obr. 8-7-2 Diagramy proudového pole s hodnotami v mezích 2 – 4,5 (nalevo) a 4,5 – 10 (napravo).

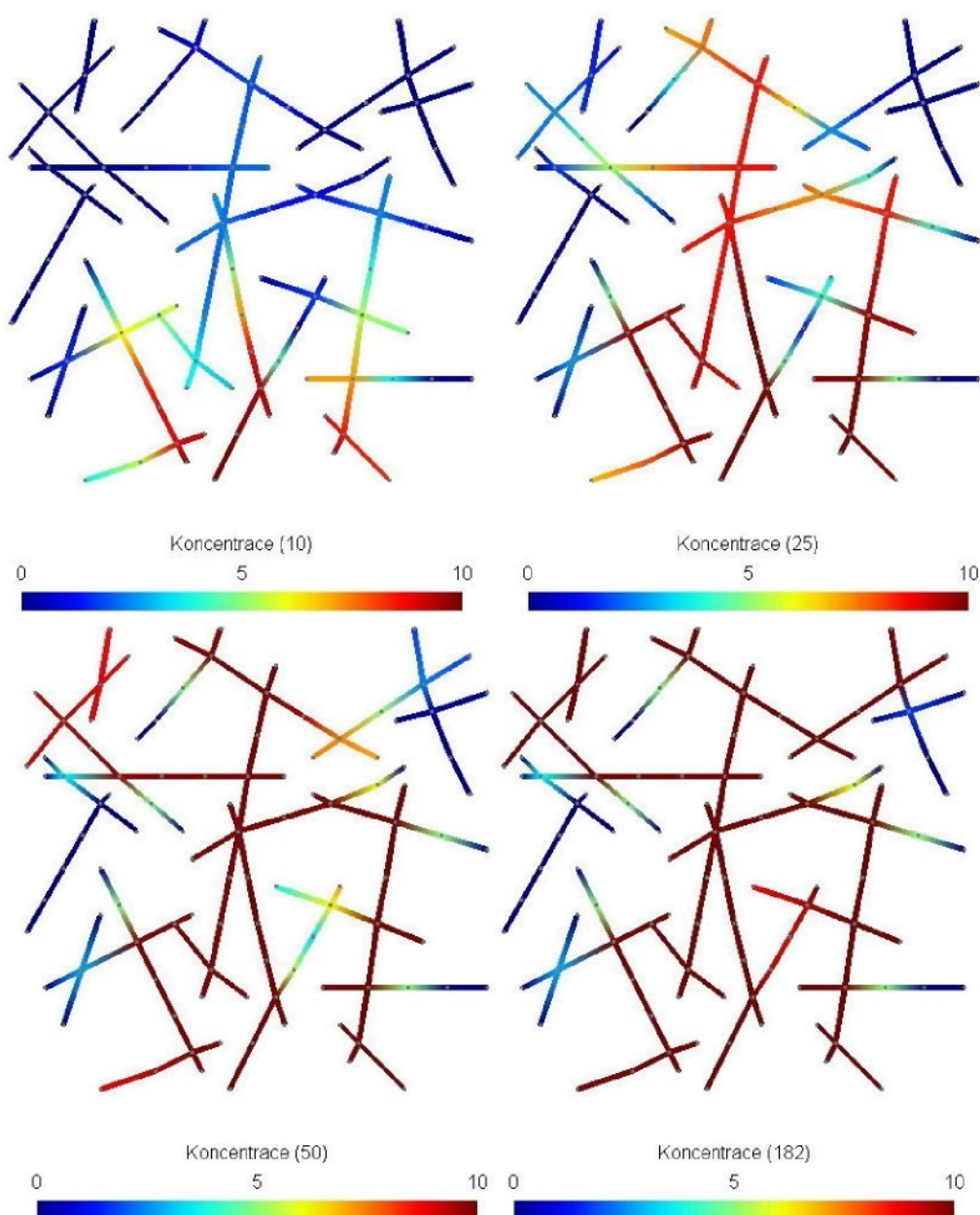
Výsledky transportu látky:

Pro horizontální směr transportu látky jsou zobrazeny tyto čtyři ukázkové snímky 5 ($v t = 0,35$ dnů), 15 ($v t = 1,05$ dnů), 30 ($v t = 2,10$ dnů), 142 ($v t = 9,93$ dnů) z celkového počtu 142 snímků, při nastavené celkové délce doby transportu 10 dní. Snímky jsou zobrazeny na Obr. 8-8.

Pro vertikální směr transportu látky jsou zobrazeny tyto čtyři ukázkové snímky 10 ($v t = 0,55$ dnů), 25 ($v t = 1,37$ dnů), 50 ($v t = 2,73$ dnů), 182 ($v t = 9,95$ dnů) z celkového počtu 182 snímků, při nastavené celkové délce doby transportu 10 dní. Snímky jsou zobrazeny na Obr. 8-9.

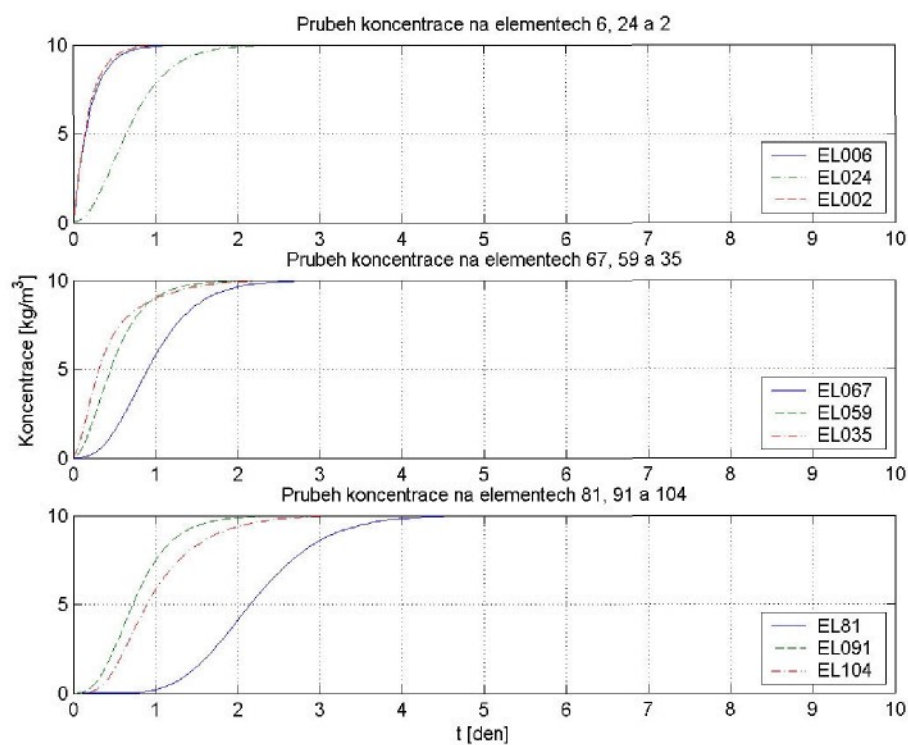


Obr. 8-8 Ukázkové snímky transportu látky, v horizontálním směru toku

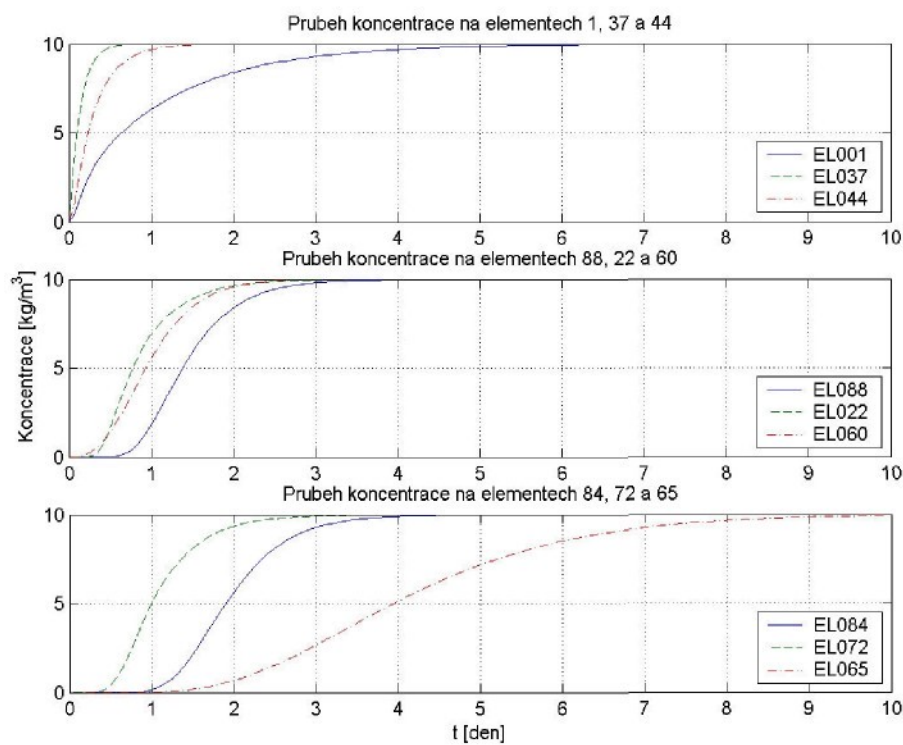


Obr. 8-9 Ukázkové snímky transportu látky, ve vertikálním směru toku

Pro názornější zobrazení nárůst koncentrace v testované síti u horizontálního směru toku jsou v grafu vyneseny hodnoty třech elementů na začátku sítě (6, 24, 2). Třech elementů ve středu sítě (67, 59, 35) a třech elementů, které jsou umístěny na konci sítě (81, 91, 104). Umístění jednotlivých elementů v síti je vyznačeno na Obr. 8-1 nalevo. Výsledný graf je zobrazen na Obr. 8-10.



Obr. 8-10 Grafy průběhu koncentrace v různých místech sítě, pro horizontální směr toku.

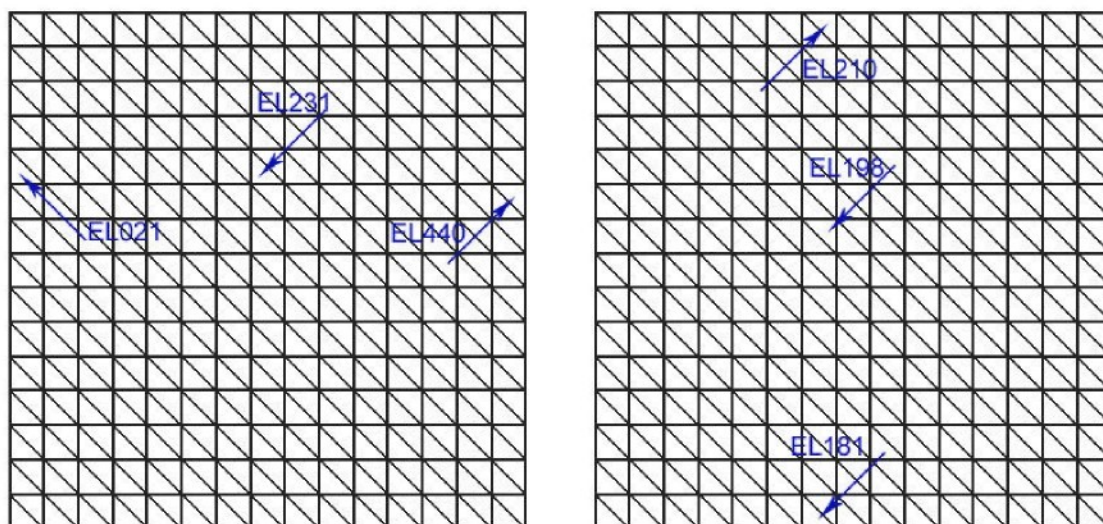


Obr. 8-11 Grafy průběhu koncentrace v různých místech sítě, pro vertikální směr toku.

U vertikálního směru toku jsou vyneseny hodnoty průběhu koncentrace pro tři elementy (1, 37, 44) umístěny na začátku sítě ve směru toku, další tři elementy (88, 22, 60) umístěny ve středu sítě a další tři elementy (84, 72, 65) umístěny na konci sítě ve směru toku. Výsledný grafy jsou zobrazeny na Obr. 8-11.

8.2. Náhrada porézním médiem s horizontálním a vertikálním tokem

Pro náhradu porézním médiem byla vytvořena čtvercová strukturovaná síť, o velikostně velikosti 5x5 metrů a hustota 15 x 15 elementů. Síť je pro vertikální a horizontální směr shodná, to je možné vidět na Obr. 8-12.



Obr. 8-12 Síť pro náhradu porézním médiem s vyznačenými elementy pro, které byly vyneseny grafy (pro horizontální tok nalevo a vertikální tok napravo)

Nastavení propustnosti:

Pro porézní materiál je dána materiálová konstanta $K_{\text{POREZ}} = 2,5$ [m/den]. Její definovaný typ je 21. Materiál v cele sítě homogenní.

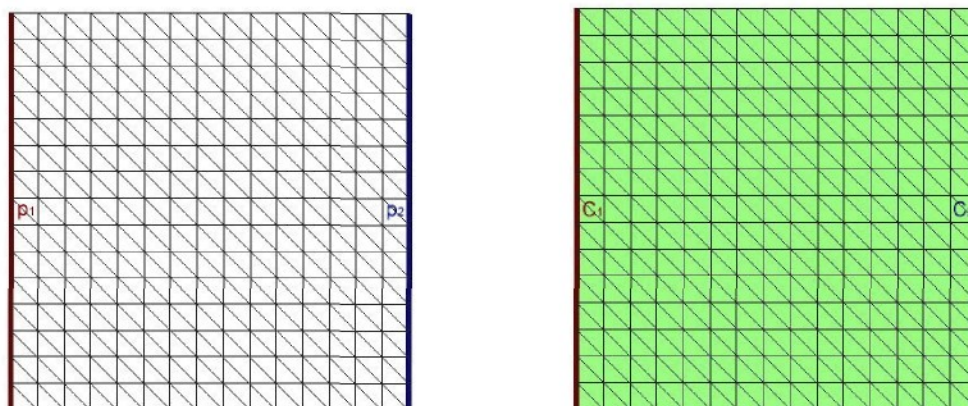
Nastavení okrajových podmínek toku:

V úloze jsou zvoleny Dirichletovy okrajové podmínky. Jejich hodnoty jsou: $p_1 = 5$, $p_2 = 1$. Umístění na okraje elementů je možné vidět na Obr. 8-13-1 a 8-13-2 nalevo.

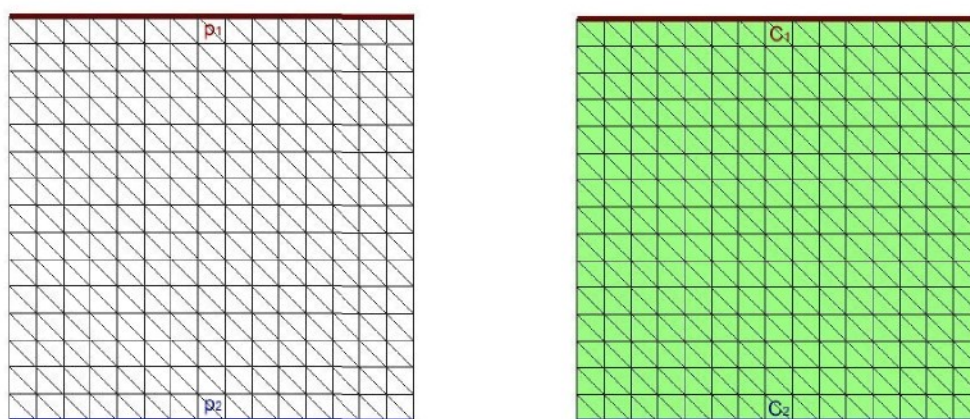
Nastavení krajové podmínky transportu a počáteční koncentrace:

Umístění okrajových podmínek transportu je stejně jako u podmínek toku viz Obr. 8-13.1, a Obr. 8-13.2 napravo. U podmínky p_1 je nastavena hodnota koncentrace $c_1 = 10$

[kg/m³], u podmínky p_2 je nastavena hodnota koncentrace $c_2 = 0$ [kg/m³]. V obou sítích je nastavena nulová počáteční koncentrace.



Obr. 8-13-1 Umístění okrajových podmínek, podmínek transportu a počáteční koncentrace v síti pro horizontální směr toku.



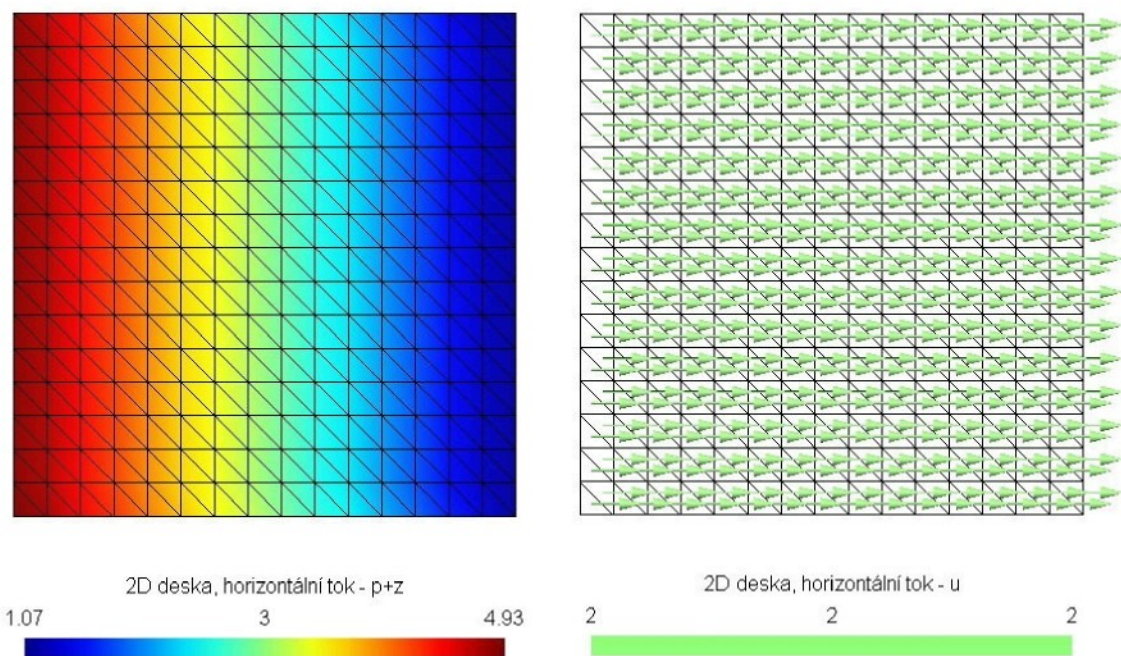
Obr. 8-13-2 Umístění okrajových podmínek, podmínek transportu a počáteční koncentrace v síti pro vertikální směr toku.

Výsledky proudění v síti:

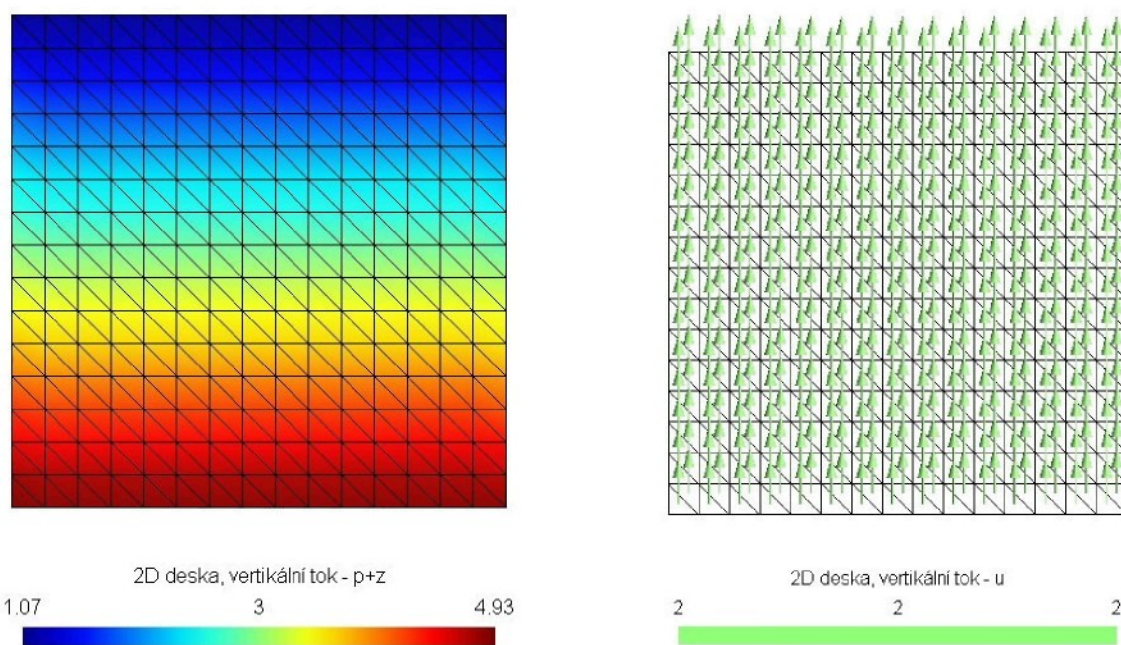
Výsledný tok přes oblast, je v horizontálním i vertikálním směru, při nastavené materiálové konstantě $K_{\text{POREZ}} = 2,5$ [m/den] roven:

$$10,00 \text{ [m}^3\text{/den]}.$$

Na Obr. 8-14-1 jsou zobrazeny diagramy pro horizontální směr toku a na Obr. 8-14-2 jsou diagramy pro vertikální směr toku. Nalevo je diagram rozložení tlaků v síti a napravo je diagram proudového pole.



Obr. 8-14-1 Diagram rozložení tlaků v síti a diagram proudového pole.(horizontální směr)

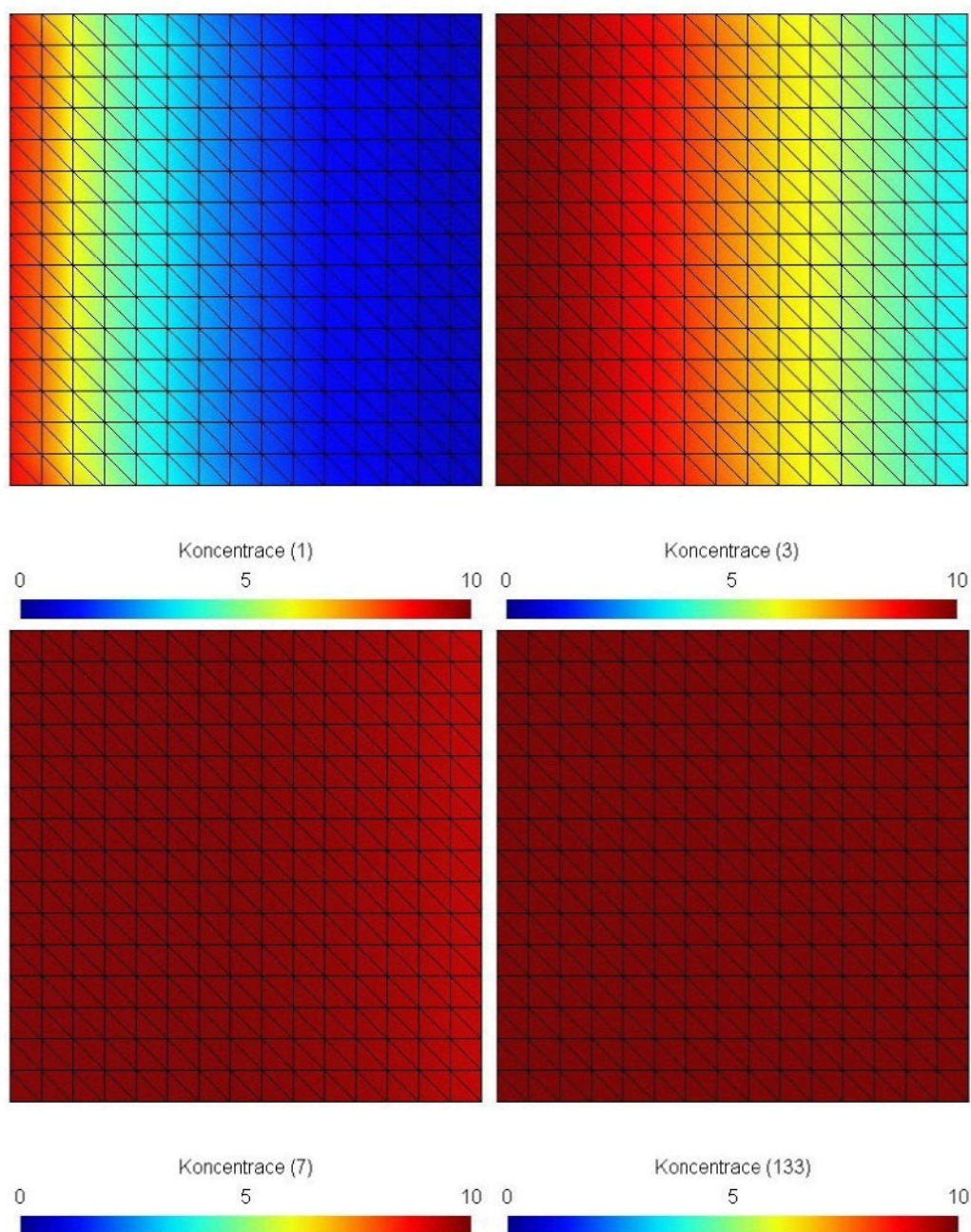


Obr. 8-14-2 Diagram rozložení tlaků v síti a diagram proudového pole (vertikální směr)

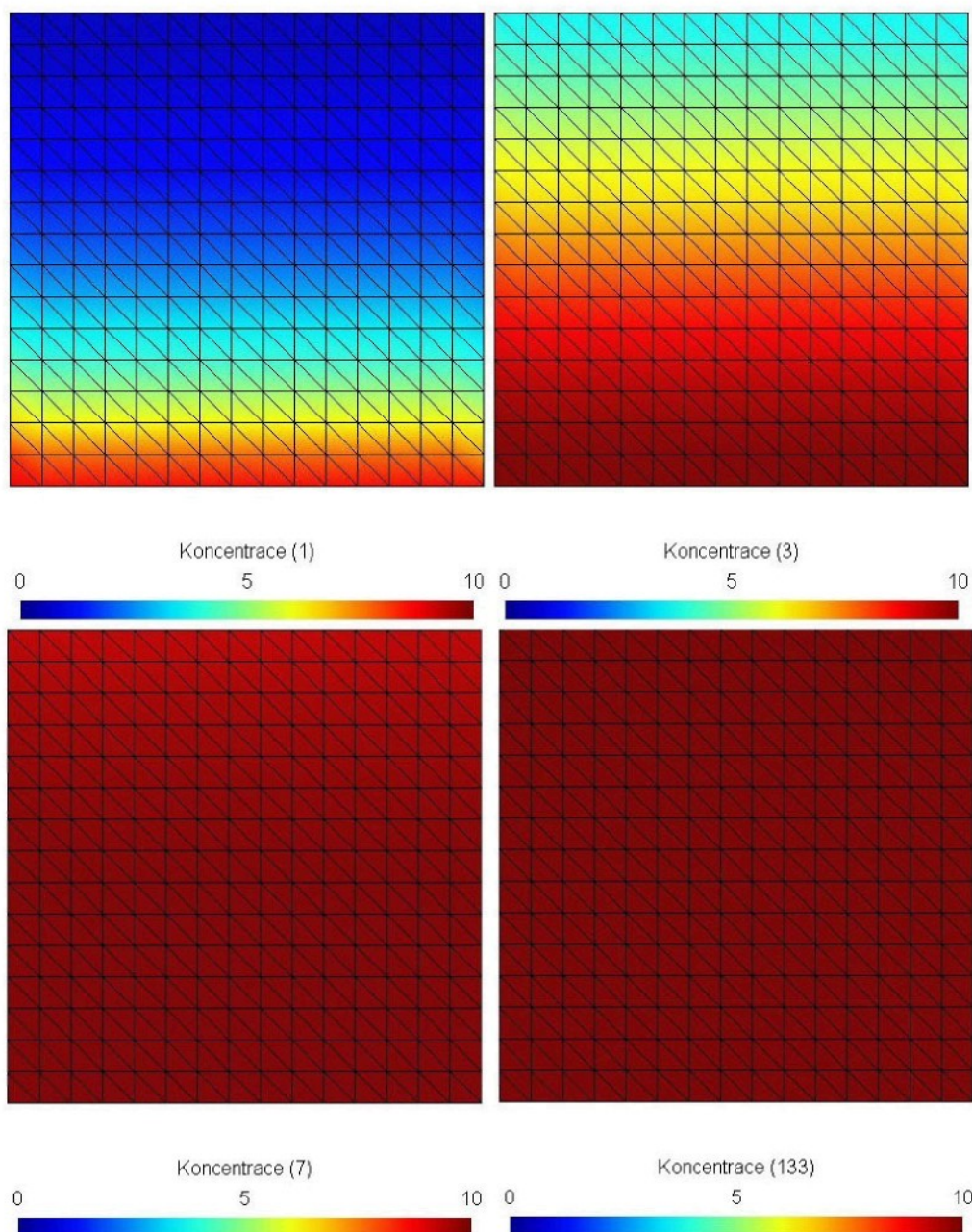
Výsledky výpočtu transportu látek:

Vypočtené hodnoty transportu látek jsou v programu zobrazeny jako animace, z tohoto důvodu, jsou zde uvedeny jen ukázkové snímky (1, 3, 7, 133). Snímek 1 je v čase 0,07 dnů, snímek 2 je v čase 0,22 dnů, snímek 3 je v čase 0,45 dnů a poslední snímek 4 je v čase 9,92

dnů při nastavené délce simulace 10 dnů. Ukázkové snímky je možné vidět na obrázcích Obr. 8-15-1 a Obr. 8-15-2. Pro oba směr transportu, jsou zobrazeny shodné časové snímky.

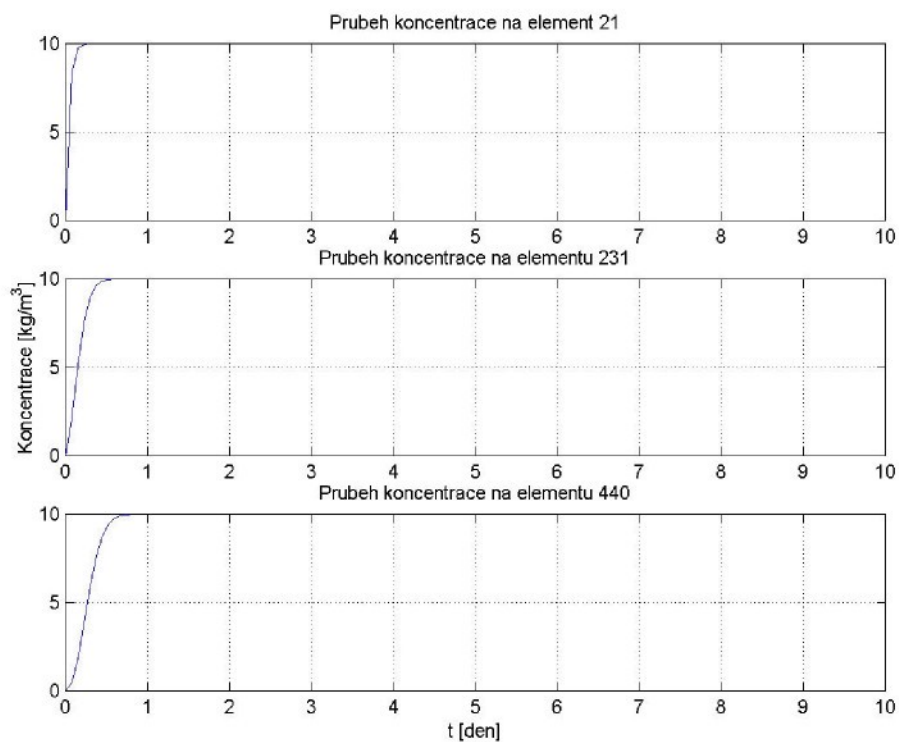


Obr. 8-15-1 Ukázkové snímky průběhu transportu pro horizontální směr toku.

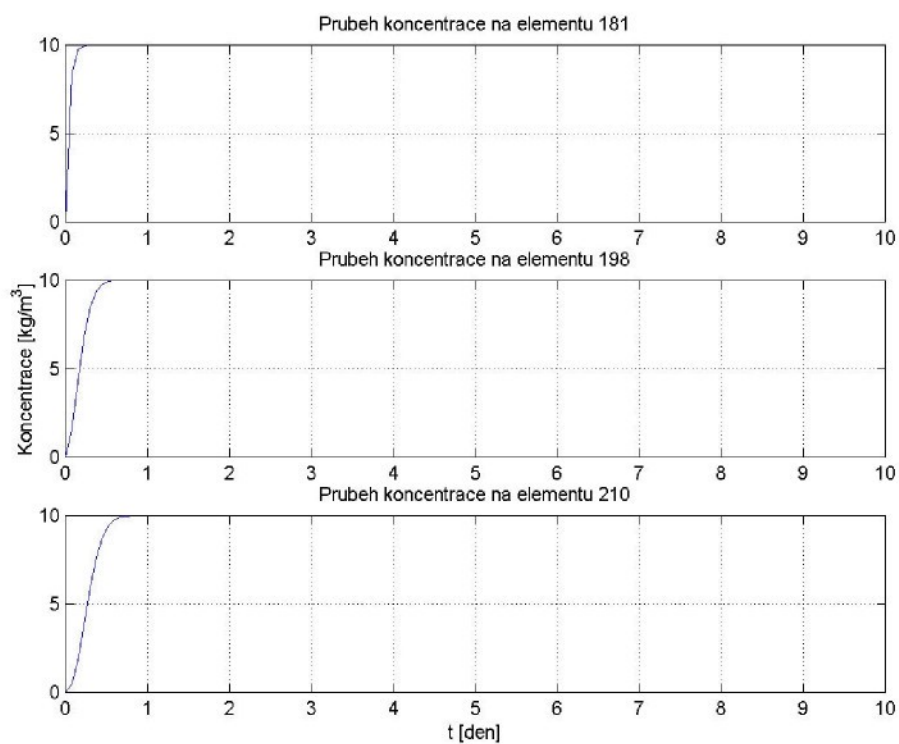


Obr. 8-15-2 Ukázkové snímky průběhu transportu pro vertikální směr toku.

Pro lepší zobrazení nárůstu koncentrace v síti jsou do grafů vyneseny hodnoty pro tři elementů. Pro horizontální směr transportu jsou vybrány elementy 48, 231 a 440 umístění dle Obr. 8-12 nalevo. Graf je zobrazen na Obr. 8-16-1 Pro vertikální směr transportu jsou vybrány elementy 181, 198 a 210 podle Obr. 8-12 napravo. Graf je zobrazen na Obr. 8-16-2.



Obr. 8-16-1 Průběh koncentrace na elementech 12, 231 a 440 pro horizontální směr toku



Obr. 8-16-2 Průběh koncentrace na elementech 181, 198 a 210 pro vertikální směr toku

8.3. Vyhodnocení výsledků třetího testu:

Výsledný tok přes oblast je ve všech čtyřech částech úlohy $10 \text{ [m}^3\text{/den]}$ při nastavených materiálových konstantách:

- náhrady porézním médiem (v horizontální i vertikálním směru):

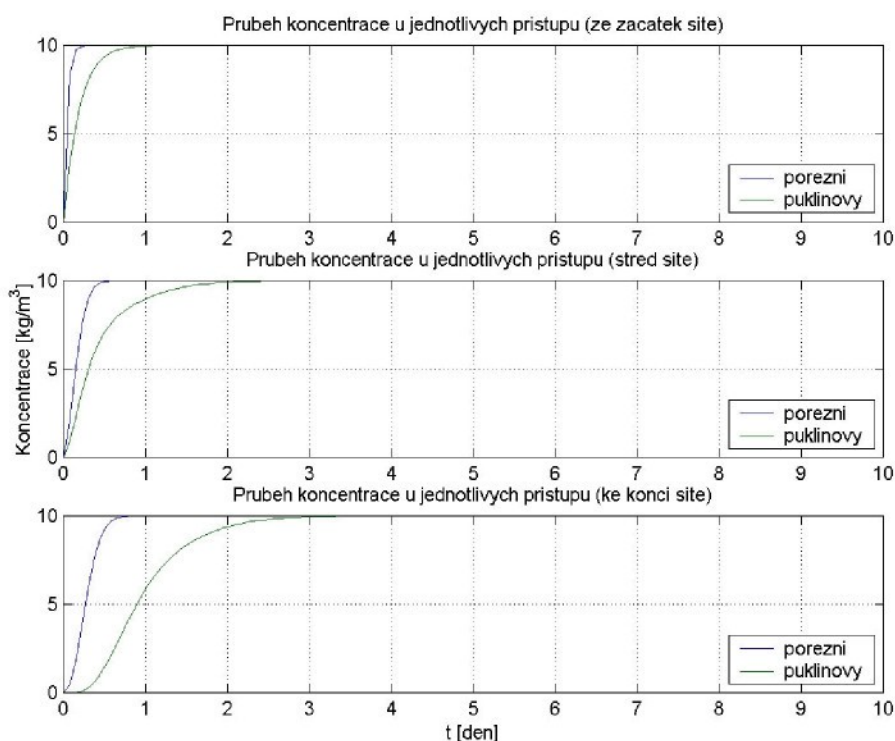
$$K_{\text{POREZ_H}} = K_{\text{POREZ_V}} = 2,5 \text{ [m/den]}$$

- ryze puklinový přístup:

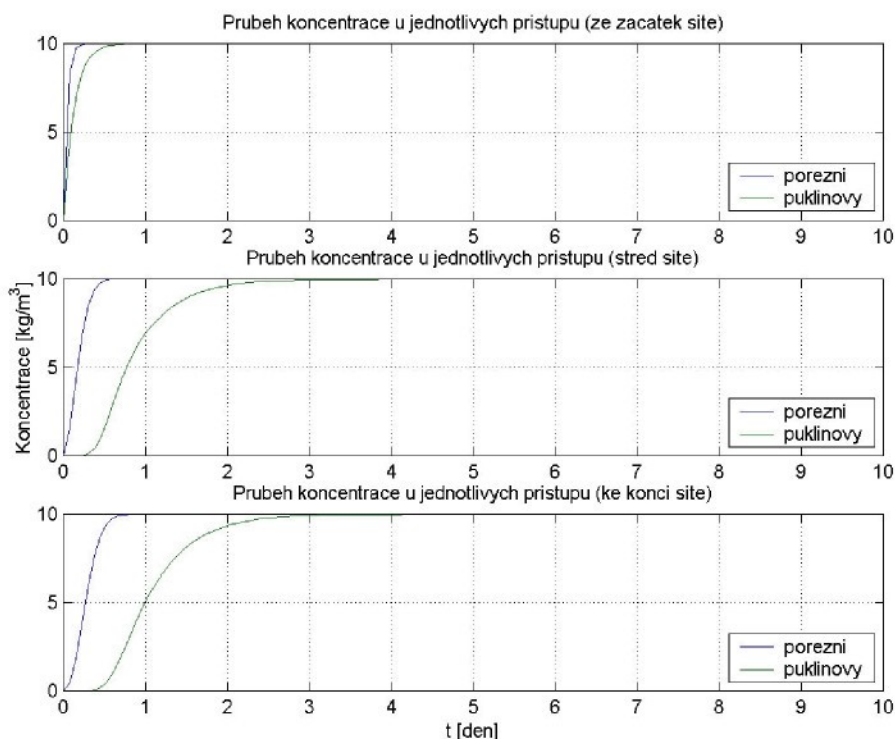
$$\text{v horizontálním směru: } K_{\text{PUKLIN_H}} = 6,5 \text{ [m/den]}$$

$$\text{v vertikálním směru: } K_{\text{PUKLIN_H}} = 6,5 \text{ [m/den]}.$$

Grafy na Obr 8-17 a 8-18 jsou vyneseny pro elementy vyznačené na Obr. 8-1 a Obr. 8-12. V horizontálním směru pro ryze puklinový přístup jsou vyneseny hodnoty červeně označených elementů (Obr. 8-1 nalevo). Pro vertikální směr toku jsou vyneseny hodnoty zeleně označených elementů (Obr 8-1 napravo).



Obr. 8-17 Grafy porovnání průběhů koncentrací jednotlivých přístupů pro horizontální směr



Obr. 8-18 Grafy porovnání průběhů koncentrací jednotlivých přístupů pro vertikální směr

U náhrady porézním médiem jsou výsledky jak v horizontálním tak i vertikálním směru shodné v rámci své orientace. Proudové pole je v obou případech homogenní v celé síti a má velikost $2 \text{ [m}^3/\text{den}]$. Taktéž i rozložení tlaků v síti. U náhrady porézním médiem dochází k rovnoměrnému transportu, obou případech stejně. To je také patrné i z grafů nárůstu koncentrace ve vybraných elementech (Obr. 8-17 a Obr. 8-18). Hodnoty náhrady porézním médiem jsou zobrazeny modrou čarou.

Oproti tomu, u ryze puklinového přístupu, u které bylo také použito shodných sítí, se výsledky liší. Je to dáno různými profily sítě v horizontální a vertikálním směru. Z proudového diagramu pro horizontální směr je rozloženo pravidelněji ve dvou mezích, než je tomu u vertikálního směru, ve kterém jsou vidět větší rozdíly mezi jednotlivými proudy v síti. Diagramy jsou zobrazeny na obrázcích Obr. 8-5, 8-7-1 a 8-7-2. Díky tomu je patrné rychlejší šíření transportované látky v horizontálním směru. Z grafů je patrné, že oproti porézním náhradě, dochází v různých částech sítě k nárůstu koncentrace různou rychlostí. V nejrychlejší cestě v síti se na koncovém elementu ustálí koncentrace na hodnotě $c = 10 \text{ [kg/m}^3]$ za dva dny, u vertikálního směru je to o jeden den delší.

Z porovnání úloh ve stejných směrech je patrné, že při použití náhrady porézním médiem se ztrácejí přesnější údaje o toku v sítích a transportu látky. Náhrada porézním

mediem nám říká, že k transportu dochází v celé oblasti rovnoměrně a že v celé oblasti dosáhne hodnota koncentrace maxima za necelý den. Oproti tomu u puklinového přístupu dochází k transportu o poznání pomaleji. U transportu v horizontálním směru je maximální hodnota na výstupu dosažena až po dvou dnech a u vertikálního dokonce až po třech dnech. A také je patrné, že nedojde ke kontaminaci celé oblasti. V místech s nulovým prouděním dojde jen k částečné kontaminaci za pomoci vzlínání.

9. Závěr

V bakalářské práci jsou provedeny numerické experimenty na programu (flow123D) kombinovaného modelu průtoku puklinovým prostředím a transportu látek. Cílem testování bylo srovnání vlastností tří přístupů k problematice proudění a transportu v puklinové síti. Testovaný byly tyto přístupy:

- ryze puklinový přístup
- náhrada porézním médiem o stejných vlastnostech
- kombinovaný model

Pro porovnání vlastností byly provedeny testy na třech různých sítích. V prvním testu se porovnávaly jednotlivé přístupy na dvou horizontálních puklinách a dvou vertikálních puklinách. Z testů je patrné, že když tok přes oblast u všech tří přístupů shodný, nedochází k transportu sítí stejnou rychlostí. Nejrychlejší nárůst koncentrace je viděn u ryze puklinového přístupu a nejpomalejší nárůst je u kombinovaného přístupu. U transportu je možné vidět také ve způsobu šíření látky. U ryze puklinového přístupu a náhrady porézním médiem je nárůst koncentrace v síti rovnoměrný ve směru proudění. U kombinovaného modelu je nárůst v síti různý. To je dáno různou rychlostí proudění v puklinové a porézní části.

V druhé simulaci byl proveden test na síti tvořené jednou hlavní puklinou a několika vedlejšími. Hlavní část toku byla u všech tří přístupů vedena hlavní puklinou. Rychlosti nárůstů koncentrací je shodné jako v prvním testu. K nejrychlejšímu nárůstu dochází u ryze puklinového přístupu a nejpomalejšímu u kombinovaného. Další patrný rozdíl v tomto testu, je patrný z ukázkových snímků transportu. V ryze puklinové síti je vidět, že do slepých částí puklin, kde je proudění nulové, dojde jen k částečnému vzlínání transportované látky. Za to u dvou zbylých přístupů dochází rozsáhlému rozšíření transportované látky v celé síti až na dva rohové elementy.

Třetí test byl proveden na ryze puklinové síti a na přístupu náhrady porézním médiem. Puklinová síť je dvořena náhodně rozloženými puklinami. Testy na sítích byl proveden pro horizontální a vertikální směr proudění. Propustnosti sítí byly nastaveny tak, aby byly stejný tok přes oblasti. U náhrady porézním médiem jsou výsledky v horizontálním i vertikálním směru shodné. Podle porézní náhrady dojde k rozšíření transportované látky do celé oblasti. Tok v síti je homogenní a transport látky je rovnoměrný ve směru toku v celé šíři sítě. U ryze puklinového přístupu je rychlost toku a transportu dána profilem sítě. Oproti

náhradě porézním médiem, nedojde k rozšíření transportované látky do celé sítě, k nárůstu dojde v puklinách, kde není nulový tok. U puklin s nulovým tokem dojde jen k částečnému šíření vztlínáním, ale i přes tuto skutečnost zůstávají v síti místa s nulovou koncentrací. Z provedených testů jsou patrné výhody a nevýhody jejich použití.

U ryze puklinového přístupu je možné dobře sledovat rychlost proudění a nárůst koncentrací v různých místech oblasti. Také je možné vidět jaké části oblasti budou kontaminovány a do kterých částí se transportovaná látka nebude šířit. To je pěkně vidět u třetího testu, kde se v síti nacházejí místa s nulovou koncentrací a z grafu jsou vidět různé rychlosti nárůstu koncentrace. Jeho nevýhodou je příprava diskrétní sítě oblasti, pro kterou chceme provést simulaci. Praktické využití ryze puklinového přístupu, je patrné pro menší oblasti, kde je zapotřebí co nejpřesnější znalost proudění a transport v dané oblasti.

U náhrady porézním médiem je vidět, že pomocí tohoto přístupu nelze přesněji určit místa, ve kterých dojde ke kontaminaci a nelze sledovat, kudy bude transportovaná látka šířit. To je patrné u posledního testu, kde podle náhrady porézním médiem dojde ke kontaminaci celé oblasti. Rychlost šíření v oblasti bude v celé oblasti stejná. Z důvodu nemožnosti podrobně sledovat procesy v námi sledované oblasti se tento přístup nehodí na oblasti, kde je zapotřebí přesnějších informací o šíření transportované látky. Možné využití této metody je při simulaci rozsáhlých puklinových systému, kde by nebylo možné vytvořit přesnou puklinovou síť.

U kombinovaného přístupu jsou důležité pukliny nahrazeny diskrétní sítí a méně důležité pukliny porézním médiem. U toho přístupu je výhodou simulace rozsáhlejších oblastí a zároveň možnost sledovat rozdíly v šíření transportované látky v oblasti. Z testů je patrná rozdílná rychlost v puklinách a v porézní části. Hlavnímu šíření dochází za pomoci puklin a následně k šíření z těchto puklin do blízkého okolí.

Použitá literatura

[1] Maryška J., Severýn O., Tauchman M., Tondr D.: 2005, Modelling of the groundwater flow in fractured rock – a new approach, In Proceedings of Algoritmy 2005 (K. Mikula, ed.), Slovak Technical University, Bratislava, pp.113-122

[2] Bear, J., Tsang, C.-F. & De Marsily, G.: 1993, Modelling Flow and Contaminant Transport in Fractured Rocks, USA: Academic Press, Inc.

[3] Kazda I.: 1983, Proudění podzemní vody: řešení metodou konečných prvků. Nakladatelství technické literatury, Praha.

[4] Tondr D.: 2004, Identifikace ekvivalentních hydraulických parametrů porézního a puklinového prostředí. Diplomová práce, TU Liberec.

[5] Maryška J., Severýn O., Královcová J., Šembera J.: 2004, A novel approach to modelling of flow in fractured porous medium. Kybernetika – volume 40 (2004), TU Liberec.

[6] Tauchman M.: 2004, Model proudění kapaliny v prostředí s puklinovou a porézní propustností ve 2D. Diplomová práce, TU Liberec.

[7] Vohralík M.: 2000, Mixed-Hybrid model of the fracture flow. Diplomová práce, TU Liberec.

[8] Šamálíková M., Locker J., Pospíšil P.: 2006, Geologie. Skripta: VUT Brno, Fakulta strojní.

[9] Vohralík M.: Transport kontaminantů puklinovým prostředím skalního masivu. TU Liberec.